

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовая химия

Направление подготовки 04.04.01 – Химия

3 семестр

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Квантовая химия» являются формирование у обучающихся общетеоретических представлений о физических основах методов квантовой химии, знакомства в необходимых пределах с математическим аппаратом квантовомеханической теории и разъяснение смысла вводимых при этом понятий.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина относится к вариативной части ОПОП.

Перечень дисциплин, необходимых для успешного изучения дисциплины «Квантовая химия». 1. Математика. 2. Информатика. 3. Обработка результатов химического эксперимента. 4. Численные методы в химии. 5. Системное моделирование химических процессов. 6. Общая и неорганическая химия. 7. Физика (некоторые аспекты обработки эксперимента). Освоение дисциплины «Квантовая химия» необходимо как предшествующее для изучения следующих дисциплин: 1. Современные методы исследования в химии. 2. Математическое моделирование. 3. Физико-химическая механика.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В процессе освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие компетенции:

- Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2).

В результате освоения данной дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

1) Знать:

- Основные понятия квантовой механики, лежащие в основе квантовохимических представлений (ПК-2).
- Суть математического описания стационарных молекулярных систем и методов решения соответствующего уравнения Шрёдингера (ПК-2).
- Методы численного решения угловой и радиальной части уравнения Шрёдингера (ПК-2).

2) Уметь:

- Профессионально пользоваться основными теоретическими понятиями квантовой химии (ПК-2).
- Разбираться в основных методиках приближённого решения квантовомеханических задач (ПК-2).

3) Владеть:

- Общетеоретической методикой квантовомеханического описания микромира (ПК-2).
- Основами методик построения квантовохимического описания атомов и молекулярных систем (ПК-2).
- Основными численными методами решения прикладных задач квантовой химии (ПК-2).

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Теоретические аспекты квантовой химии. Волновая функция. Физический смысл волновой функции. Описание квантовомеханических величин с помощью операторов. Операторы основных

физических величин. Гамильтониан. Уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера. Водородоподобные атомы. Уравнение Шрёдингера в сферических координатах. Решение R-уравнения. Решение Ф-уравнения. Решение Θ -уравнения. Численный расчёт радиальной и угловой функций и атомных орбиталей в целом для различных квантовых чисел.

5. ВИД АТТЕСТАЦИИ

Вид аттестации: зачёт.

6. КОЛИЧЕСТВО ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.

Составитель: доцент кафедры химии Лобко В.Н.

Заведующий кафедрой химии Кухтин Б.А.

Председатель учебно-методической комиссии

направления 04.03.01 – “Химия” Кухтин Б.А.

Директор ИБЭ Ильина М.Н.

Дата:

Печать института



Кухтин

Кухтин

Ильина