

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Квантовая химия»

Рабочая программа дисциплины «Квантовая химия» разработана для студентов 4 курса направления 03.03.02 «Физика», профиль «Теоретическая физика» в соответствии с требованиями ОС ВО по данному направлению.

Дисциплина «Квантовая химия» относится к разделу Б1.В.ДВ.05.02 дисциплин по выбору учебного плана.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часа. Учебным планом предусмотрены лекционные занятия (18 час.) и практические занятия (26 час), самостоятельная работа (100 час. в том числе на подготовку к экзамену 45 час). Дисциплина реализуется в 7 семестре 4 курса.

Содержание программы данной дисциплины базируется на знаниях, заложенных в полном школьном курсе математики, физики и химии, дисциплинах базовой части математического и естественнонаучного цикла: математика, физика, информатика, а также дисциплине «Общая химия», читаемых студентам первого и второго курсов.

Для успешного освоения дисциплины «Квантовая химия» студенты должны знать теоретические основы химии (состав, строение и химические свойства основных простых веществ и химических соединений, связь строения вещества и протекания химических процессов), фундаментальные разделы математики (линейную алгебру, математический анализ, дифференциальные уравнения, теорию вероятности), фундаментальные разделы физики (механику, молекулярную физику и термодинамику, электродинамику, атомную физику, основы квантовой механики). Студенты должны уметь использовать теоретические знания для анализа основных задач квантовой химии, использовать программное обеспечение компьютеров для планирования квантово-химических исследований, анализа расчетных данных.

Целями освоения дисциплины «Квантовая химия» являются:

- обеспечение подготовки специалистов в области теоретических и расчетных методов современной химии,
- формирование у специалистов целостного естественнонаучного мировоззрения,
- знакомство с основными понятиями и определениями квантовой механики, а также с современным состоянием квантовой химии.

Задачи:

- овладение фундаментальными принципами и методами решения научных и практических задач;

- формирование навыков по применению приложений фундаментальной науки к грамотному научному анализу ситуаций, с которыми специалисту придется сталкиваться при создании или использовании новых технологий;
- освоение основных теорий, позволяющих описать явления в природе, и пределов применимости этих теорий для решения современных и перспективных профессиональных задач;
- формирование у студентов основ естественнонаучной картины мира.

Для успешного изучения дисциплины «Квантовая химия» у обучающихся должны быть сформированы следующие предварительные компетенции:

- готовность к саморазвитию, повышению своей квалификации и мастерства
- владение основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, иметь навыки работы с компьютером как средством управления информацией ;

В результате изучения данной дисциплины у обучающихся формируются следующие общекультурные и общепрофессиональные компетенции (элементы компетенций).

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
ПК-6 способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	Знает	основные понятия, постулаты, приближенные методы решения уравнения Шредингера, результаты его решения для модельных задач квантовой химии; основные характеристики электронной структуры атомов и молекул; методику расчетов электронной структуры атомно-молекулярных систем; основные понятия и определения квантовой механики, а также с современное состояние квантовой химии. фундаментальные принципами и методами решения научных и практических задач;
	Умеет	применять теорию для классификации атомных и молекулярных состояний; рассчитывать молекулярные свойства химических систем; формулировать квантово-химическую задачу и решать ее с использованием соответствующих программ; выбирать базисные наборы и квантово-химические методы для расчета требуемых свойств различных химических систем; использовать основные законы квантовой

		химии в профессиональной деятельности
	Владеет	приемами и методами математического анализа и моделирования, теоретического исследования химических процессов; системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания; навыками работы с компьютерами в области квантово-химического моделирования химических процессов; навыками работы с типичными квантово-химическими программами, расчета и интерпретации характеристик электронного строения и свойств атомных и молекулярных систем.

Для формирования вышеуказанных компетенций в рамках дисциплины «Квантовая химия» предусмотрены следующие методы активного/интерактивного обучения: лекция-беседа; групповая консультация (для практических занятий).