

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.9.2 Квантовая химия

по направлению подготовки: 18.03.01 «Химическая технология»

по профилю «Технология тугоплавких неметаллических и силикатных материалов»

Квалификация выпускника: БАКАЛАВР

Выпускающая кафедра: ТНВМ

Кафедра-разработчик рабочей программы: «Технология неорганических веществ и материалов»

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Квантовая химия» являются:

- а) изучение основных положений квантовой механики;
- б) овладение навыками работы с программой визуализации Chemcraft для исследования строения молекулярных систем;
- в) приобретение практических навыков проведения расчетов с использованием квантово-химических программ «Priroda 6» и «Gaussin 98» для оптимизации изучаемых объектов.

2. Содержание дисциплины «Квантовая химия»:

Строение электронной оболочки атома. Волновая функция электрона, уравнение Шредингера, его решение для простейших задач.

Теория электронного строения молекул. Молекулярные орбитали. Проблема учета электронной корреляции.

Полуэмперические методы квантовой химии. Квантово-химические методы и базисные наборы в неэмперических методах.

Современные квантово-химические программы, их возможности, сравнительная оценка.

Структура входных и выходных файлов программ «Природа» и «Gaussian».

Программы-визуализаторы. Основные принципы использования программ Chemcraft и GaussView.

3. В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

1) Знать:

- а) основные положения квантовой механики и современной теории химической связи;
- б) принципы описания атомной и электронной структуры молекулярных систем;
- в) основные взаимосвязи между электронной структурой и физико-химическими свойствами веществ;
- г) возможности основных современных квантово-химических программ и области их применения.

2) Уметь:

- а) применять квантово-химические подходы и методы для интерпретации и предсказания строения и свойств молекулярных систем.

3) Владеть:

а) навыками применения квантово-химических подходов и методов при решении практических технологических задач и стандартными квантово-химическими компьютерными программами.

Зав. каф. ТНВМ



Хацринов А.И.

