

Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Квантовая химия» является частью математического и естественнонаучного цикла дисциплин подготовки бакалавров по направлению подготовки 020100 «Химия» по профилю «Органическая и биорганическая химия». Дисциплина реализуется на химико-технологическом факультете ФГБОУ ВПО «Самарский государственный технический университет» кафедрой органической химии.

Цели и задачи дисциплины: Основная цель изучения квантовой химии - обеспечить объём знаний, отвечающих фундаментальной дисциплине в системе химического образования и формирования научного мировоззрения.

Требования к уровню освоения содержания дисциплины.

Дисциплина нацелена на формирование общекультурных компетенций ОК-6, ОК-9, профессиональных компетенций ПК-2, ПК-3 выпускника.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с изучением методов квантово-химического исследования и приобретения навыков их практического использования, изучение постулатов квантовой механики, не зависящее от времени уравнение Шрёдингера, решение этого уравнения для простейших систем, приближённые решения уравнения для сложных молекул, современное состояние теории и её реализация в компьютерных программах, изучение методов расчета электронной структуры и геометрии органических молекул и методов интерпретации полученных результатов.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, самостоятельная работа студента.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля: текущий контроль успеваемости в форме контрольной работы, рубежный контроль в форме контрольной работы и промежуточный контроль в форме экзамена.

Общая трудоемкость освоения дисциплины составляет 4 зачётных единицы, 144 часа. Программой дисциплины предусмотрены лекционные (36 часов), практические (36 часов) занятия и 45 часов самостоятельной работы студента.