

Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Квантовая химия» является частью профессионального цикла дисциплин подготовки студентов по направлению подготовки 020200 «Фундаментальная и прикладная химия», специальность 020201 «Фундаментальная и прикладная химия», специализации 020201.03 «Органическая химия» и 020201.19 «Фармацевтическая химия». Дисциплина реализуется на химико-технологическом факультете ФГБОУ ВПО «Самарский государственный технический университет» кафедрой органической химии.

Цели и задачи дисциплины. Целью освоения дисциплины "Квантовая химия" является формирование общекультурных и профессиональных компетенций, необходимых для реализации научно-исследовательской и научно-производственной деятельности:

ОК-6: умение логически верно, аргументировано и ясно строить устную и письменную речь, владеть развитой письменной и устной коммуникацией,

ОК-8: умение работать с компьютером на уровне пользователя, применять навыки работы с компьютером как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности,

ОК-10: владеть основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, иметь навыки работы с компьютером как средством управления информацией,

ПК-4: уметь использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования,

ПК-11: знать основы теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, органической, аналитической, физической, химии высокомолекулярных соединений, биологических объектов, химической технологии),

ПК-12: уметь применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных.

Задачами изучения дисциплины являются приобретение знаний, умений и формирование навыков, способствующих формированию целевых компетенций.

Требования к уровню освоения содержания дисциплины.

В результате изучения дисциплины студент должен приобрести:

знания об основных приближениях квантовой химии и принципах методов, используемых при расчетах электронной структуры, строения и реакционной способности химических соединений;

умения пользоваться современными представлениями квантовой химии для объяснения специфики поведения химических соединений и современным программным обеспечением расчетных методов квантовой химии;

понимание возможности использования расчетных результатов квантовой механики в статистической термодинамике, теории элементарного акта химических превращений, молекулярной спектроскопии и других разделах современной химии.

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 проверки письменных домашних заданий, рубежная аттестация в форме тестирования и промежуточный контроль в форме экзамена.

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