

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

Должность: врио ректора

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Дата подписания: 09.08.2023 12:16:55

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

28 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

## Квантовая механика и квантовая химия

### Направление подготовки

04.03.01 Химия

### Направленность (профиль)

Перспективные материалы: синтез и анализ

Для студентов 3 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., Русакова Н.П. \_\_\_\_\_

Тверь, 2021

## **I. Аннотация**

### **1. Цель и задачи дисциплины:**

Квантовая механика – теоретический раздел физики, рассматривающий механику движения микрочастиц (электронов, протонов и т.д.). Она позволяет описать квантовые системы. Квантовая химия – теоретическая основа представлений современной химической науки. *Содержание дисциплины* “Квантовая механика и квантовая химия” определено следующим образом:

- основные постулаты и математический аппарат квантовой механики;
- основные положения квантовой химии;
- неэмпирические и полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул;
- качественная теория реакционной способности

**Цель дисциплины** – познакомить студента с идеями и методами квантовой механики и квантовой химии, составляющих основной теоретический фундамент современной химии.

### **Задачи дисциплины**

- раскрыть основные понятия и постулаты квантовой механики,
- помочь студентам освоить математический аппарат квантовой механики
- сформировать у студентов умение применять математический аппарат квантовой механики для решения конкретных квантовомеханических задач
- показать глубину взаимосвязи квантовой механики и квантовой химии
- выработать умение применения знаний о неэмпирических и полуэмпирических методах при работе с программным обеспечением дисциплины и т.д.

### **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия» входит в обязательную часть Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Данная дисциплина тесно связана с дисциплиной «Строение вещества».

### **3. Объем дисциплины: 4 зачетных единиц, 144 академических часов, в том числе:**

**контактная аудиторная работа;** лекции - 18 часов, практические занятия –36 часов;

**контактная внеаудиторная работа:** контроль самостоятельной работы – 20 часов;  
**самостоятельная работа:** 43 час, контроль 27 часов.

### **4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

<b>Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)</b>	<b>Планируемые результаты обучения по дисциплине</b>
--	--

<p>ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники</p>	<p>ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности ОПК-3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности</p>
<p>ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач</p>	<p>ОПК-4.1 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности</p>
<p>ОПК-5 Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p>ОПК-5.1 Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля</p>
<p>ОПК-6 Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе</p>	<p>ОПК-6.1 Представляет результаты работы в виде отчета по стандартной форме на русском языке</p>

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр:**  
экзамен в 6-м семестре.

**6. Язык преподавания русский.**