

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Должность: врио ректора

Дата подписания: 06.06.2022 16:44:45

Уникальный программный ключ:

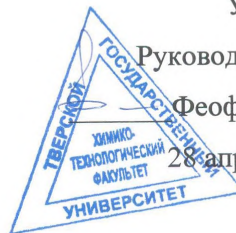
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

28 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

## Квантовая механика и квантовая химия

Специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Специализация

Химия функциональных материалов

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 квантово-механических 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.

**Уровень начальной подготовки** обучающихся для успешного освоения дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия»: хорошо *знать* математику и физику (в пределах общих курсов, изучаемых студентами-химиками). Данная дисциплина тесно связана с дисциплиной «Строение вещества», «Кристаллохимией», «Стереохимией» и др.

### **3. Объем дисциплины: 4 зачетные единицы, 144 академических часа, в том числе:**

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

**контактная внеаудиторная работа:** контроль самостоятельной работы – 20 часов;

**самостоятельная работа:** 43 часа, контроль 27 часов.

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

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
<p>ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения</p>	<p>ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности</p> <p>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 информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты 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 профессиональной деятельности 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> <p>ОПК-6.4 Готовит презентацию по теме работы и представляет ее на русском и английском языках</p>

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

**6. Язык преподавания русский.**