

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Квантовая химия»

Цель преподавания дисциплины:

фундаментальная подготовка дипломированных специалистов в области квантовой химии, современных методов исследования структуры органических жидкостей и материалов, которые являются основой в формировании химических и физических свойств технически важных материалов.

Задачи изучения учебной дисциплины:

Должен знать законы, объекты и процессы природы, включая макроскопические и микроскопические объекты; о перспективных технических системах и о физических принципах их функционирования; о стандартных базовых моделях в области квантовой химии: строение молекул и конденсированном веществе в процессе приближения к состоянию равновесия; веществе и поле в тепловом равновесии как системе квазичастиц; веществе в тепловом равновесии во внешнем поле

Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины:

- владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций (ОПК-2)
- способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий (ПК-5).

Разделы дисциплины:

- квантовая химия и квантовая механика;
- гармонический осциллятор;
- адиабатическое приближение. Одноэлектронное приближение;
- одноэлектронное приближение,
- метод Хартри-Фока Роотхана.;
- расширенный метод Хюккеля;
- неразличимость (тождественность) одинаковых микрочастиц;
- метод конфигурационного взаимодействия.