

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Квантово-химические расчеты»

Цель преподавания дисциплины:

фундаментальная подготовка дипломированных специалистов в области современных методов исследования.

Задачи изучения учебной дисциплины:

выработки у будущего специалиста комплекса навыков и знаний для использования их в последующей работе по освоению дисциплин, основанных на квантовой теории; основными вычислительными методами решения вариационных задач, уметь рационально упрощать задачу

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:

- математический аппарат квантовой механики;
- соотношение неопределенностей Гейзенберга. Изменение физических величин во времени;
- молекула водорода по Гайтлеру и Лондону. Неразличимость одинаковых микрочастиц;
- квантовая химия, ее задачи, основные понятия и развития представлений о строении атомов и молекул;
- одноэлектронное приближение, метод самосогласованного поля. Дальнейшие упрощения при решении электронных задач;
- квантово-химические расчеты.