

## Аннотация

рабочей программы учебной дисциплины Б1.Б.17 «Квантовая химия» направления подготовки бакалавров 04.03.01 Химия профиль подготовки «Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность»

**Цель изучения дисциплины** - создание основ необходимой теоретической подготовки по квантовой химии для применения этих знаний при работе в различных областях науки и техники.

**Задачами дисциплины** являются изучение:

- освоение знаний о фундаментальных физических законах и принципах, лежащих в основе современной квантовой химии; наиболее важных открытиях в области квантовой химии, оказавших определяющее влияние на развитие техники и технологии;
- овладение умениями выдвигать гипотезы и строить модели, применять полученные знания для объяснения разнообразных химических и физических явлений и свойств веществ;
- развитие познавательных интересов, интеллектуальных и творческих способностей в процессе приобретения знаний и умений.

**Основные блоки и темы дисциплины:**

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с изучением следующих разделов: дуализм явлений микромира, дискретные свойства волн, волновые свойства частиц; соотношение неопределенностей; принцип суперпозиции; наблюдаемые и состояния; чистые и смешанные состояния; эволюция состояний и физических величин; соотношения между квантовой и классической механикой; теория представлений; общие свойства одномерного движения гармонического осциллятора; туннельный эффект; квазиклассическое движение; теория возмущений; теория момента импульса; движение в центральносимметричном поле; спин; принцип тождественности одинаковых частиц; релятивистская квантовая механика; атом, Периодическая система элементов Менделеева; химическая связь, молекулы; квантование электромагнитного поля; общая теория переходов; вторичное квантование; системы с переменным числом частиц; теория рассеяния.

Учебная дисциплина «Квантовая химия» входит в перечень дисциплин базовой части ОП.

В результате изучения курса у обучающихся должны быть сформированы компетенции:

**ОПК-1** способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности

В результате изучения дисциплины бакалавр должен:

**Знать:** Основные положения квантовой механики, элементы теории представлений, решения простейших задач квантовой механики, приближенные методы квантовой механики (теория возмущений, квазиклассическое приближение, прямой вариационный метод), основные идеи и подходы к решению задач рассеяния, основы теории атомов и молекул, обобщения квантовой механики на релятивистский случай.

**Уметь:** использовать математический аппарат квантовой механики в нерелятивистском и релятивистском случаях, физически интерпретировать квантовые процессы, применять

полученную теоретическую базу для решения конкретных практических задач, грамотно работать с научной литературой с использованием новых информационных технологий.

**Владеть** основными методами научных исследований, навыками проведения физического (лабораторного) эксперимента, статистической обработки экспериментальных данных с помощью современных информационных технологий

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия» изучается с применением лекций, практическими занятиями, с выполнением контрольных работ и самостоятельной работы и завершением экзаменом.

**Общая трудоемкость дисциплины** составляет 108 часов, 3 зачетных единиц.

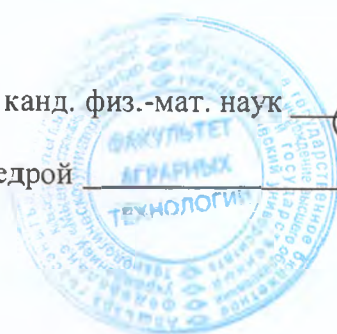
**Вид промежуточной аттестации:** 5

семестр – экзамен.

Разработчик:

проф., д-р филос. наук, канд. физ.-мат. наук \_\_\_\_\_ Р.А. Беданок

Зав. выпускающей кафедрой \_\_\_\_\_ А.А. Попова



A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Bedanokov', written over a horizontal line.

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Popova', written over a horizontal line.