

## Аннотация

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Федорова Людмила Ивановна

Должность: Проректор по учебной работе

Дата подписания: 31.10.2024 14:33:09

Уникальный программный ключ:

faa7092e1b7a7221a7371044143434

**рабочей программы учебной дисциплины "Б1.О.18 Квантовая механика и квантовая химия"**  
**направления подготовки бакалавров "18.03.01 Химическая технология"**  
**профиль подготовки "Химическая технология синтетических биологически активных веществ, химико-фармацевтических препаратов и косметических средств"**

**программа подготовки "бакалавр"**

### Цели и задачи учебной дисциплины (модуля)

**Целью** курса "Квантовая механика и квантовая химия" является изучение начал квантовой механики и ее основных приложений к химическим системам. Подробный анализ решений простейших квантово-механических задач и рассмотрение модельных систем в теории химической связи позволяют наполнить строгим физическим содержанием основные понятия, которыми химик пользуется в своей повседневной практике при характеристике свойств многоэлектронных атомов и молекулярных систем, а также определить границы применимости тех или иных теоретических закономерностей, научить прогнозировать свойства химических элементов и их соединений. Кроме того, этот курс является базой для изучения всех физико-химических методов исследования структуры молекулярных систем (ЭПР, ЯМР, спектры КР, УФ, ИК и др.) и их реакционной способности.

Программа включает в себя материал лекционного курса и семинарских занятий, а также разделы для самостоятельной работы студентов.

**Задачами дисциплины** «Квантовая механика и квантовая химия» 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

Раздел дисциплины
Тепловое излучение
Атомное строение вещества
Корпускулярно-волновой дуализм
Волновая функция
Физика атомов и молекул
Одноэлектронные атомы
Многоэлектронные атомы. Свойства многоэлектронных атомов
Теория химической связи
Промежуточная аттестация: экзамен

### Место дисциплины в структуре ОП



Дисциплина входит в перечень курсов обязательной части. Курс “Квантовая механика и квантовая химия” логически и методически связан с дисциплинами математика, физика, физика твердого тела, статистическая физика. Он необходим для успешного освоения теоретических основ неорганической и органической химии, строения вещества, физических методов исследования структуры молекулярных систем.

Студенты, изучающие дисциплину “Квантовая механика и квантовая химия”, должны иметь базовые знания по математике и физике.

**В результате изучения дисциплины бакалавр должен обладать следующими компетенциями:**

<b>ПКУВ-2:</b> Способен руководить проектами и программами по внедрению новых методов и моделей организации и планирования производства на уровне промышленной организации		
<b>ПКУВ -2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике по всем доступным базам данных, в том числе патентным базам данных</b>		
технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	находить общую информацию для решения профессиональных задач, использовать несколько программных продуктов для обработки экспериментальных данных и подготовки научных публикаций и докладов	навыками получения общей научно-технической информации в сети Интернет; в сжатые сроки освоить новое программное обеспечение под руководством специалиста более высокой квалификации, способен подготовить тезисы доклада и презентацию по заданной теме при наличии шаблона
<b>ПКУВ-2:</b> Способен руководить проектами и программами по внедрению новых методов и моделей организации и планирования производства на уровне промышленной организации		
<b>ПКУВ -2.2 Составляет литературные обзоры по заданной тематике с использованием всех доступных источников</b>		
методологию поиска научной и технической информации в сети Интернет и специализированных баз данных; основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных	проводить поиск научной и технической информации с использованием общих и специализированных баз данных; применять специализированное программное обеспечение при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных; использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу	навыками применения специализированного программного обеспечения и баз данных при решении задач профессиональной сферы деятельности
<b>ОПК-2:</b> Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности		
<b>ОПК-2.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности</b>		
подходы к решению задач из основных разделов математики, а также их приложения к теоретической химии, принципы математического моделирования химических реакций	использовать математический аппарат при изучении и количественном описании физических процессов и явлений, а также при решении физических задач	навыками теоретического и экспериментального исследования моделей химических процессов
<b>ОПК-2:</b> Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности		
<b>ОПК-2.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности</b>		
: возможности программных пакетов общего назначения (Microsoft) при решении задач химической направленности	применять прикладное программное обеспечение при организации решения производственных задач химической направленности	навыками практического применения программного обеспечения при решении задач химической направленности
<b>ОПК-2:</b> Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности		
<b>ОПК-2.3 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности</b>		
содержание процессов и самоорганизации и самообразования, их особенностей и технологией реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности	использовать химические, математические и физические модели; определять возможность рационального использования естественнонаучных законов в различных областях науки и техники	навыками комплексного и сравнительного анализа состава, строения и химических свойств веществ
<b>ОПК-5:</b> Способен осуществлять экспериментальные исследования и испытания по заданной методике, проводить		



наблюдения и измерения с учетом требований техники безопасности, обрабатывать и интерпретировать экспериментальные данные		
<b>ОПК-5.1 Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик</b>		
методы получения, идентификации и исследования свойств неорганических и органических веществ; методики химического эксперимента	планировать эксперимент способностью самостоятельно на основе анализа литературных данных с учетом класса опасности веществ	способностью самостоятельно составлять план исследования
<b>ОПК-5:</b> Способен осуществлять экспериментальные исследования и испытания по заданной методике, проводить наблюдения и измерения с учетом требований техники безопасности, обрабатывать и интерпретировать экспериментальные данные		
<b>ОПК-5.2 Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений</b>		
теоретические основы базовых химических и физических дисциплин, методы и способы решения исследовательских задач, методики и способы проведения эксперимента, методы математической статистики	использовать информационные ресурсы, анализировать полученные в опытах результаты с использованием методов математической статистики	навыками формулирования результатов, полученных в ходе решения исследовательских задач, новыми методами исследования
<b>ОПК-5:</b> Способен осуществлять экспериментальные исследования и испытания по заданной методике, проводить наблюдения и измерения с учетом требований техники безопасности, обрабатывать и интерпретировать экспериментальные данные		
<b>ОПК-5.3 Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химико-технологического содержания</b>		
основные программные средства, критерии выбора программных средств, их функциональную структуру	применять прикладное программное обеспечение при организации решения производственных задач, создавать и изменять конфигурацию информационных систем в соответствии с потребностями и организационно-методологической структурой предприятия, настраивать, администрировать и сопровождать ИС	навыками разработки, внедрения и адаптации прикладного программного обеспечения
<b>ОПК-5:</b> Способен осуществлять экспериментальные исследования и испытания по заданной методике, проводить наблюдения и измерения с учетом требований техники безопасности, обрабатывать и интерпретировать экспериментальные данные		
<b>ОПК-5.4 Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности</b>		
пути автоматизации производственных процессов	учитывать основные требования информационной безопасности	методами использования информационных и коммуникационных технологий для решения профессиональных задач
<b>ОПК-2:</b> Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности		
<b>ОПК-2.4 Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристики</b>		
математические теории и методы, применяемые при обработке данных	использовать основные методы статистической обработки данных и аппроксимации численных характеристик	методами статистической обработки информации, основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата при обработке данных

Дисциплина "Квантовая механика и квантовая химия" изучается посредством лекций, все разделы программы закрепляются практическими, лабораторными занятиями, выполнением контрольных работ, самостоятельной работы над учебной и научно-технической литературой и завершается экзаменом.

**Общая трудоёмкость дисциплины** составляет 180 часа, 5 зачетные единицы.

**Вид промежуточной аттестации:** Экзамен.

Разработчик:	Подписано простой ЭП 28.06.2023	Беданокос Рамазан Асланович
Зав. кафедрой:	Подписано простой ЭП 28.06.2023	Попова Ангелина Алексеевна
Зав. выпускающей кафедрой:	Подписано простой ЭП 28.06.2023	Попова Ангелина Алексеевна

