

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной работе

Дата подписания: 01.08.2023 11:12:29

Уникальный идентификатор документа:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования**

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

Аннотация рабочей программы учебной дисциплины

Квантовая химия и теория химической связи

Закреплена за подразделением

Кафедра физической химии

Направление подготовки

28.03.03 НАНОМАТЕРИАЛЫ

Профиль

Квалификация **Бакалавр**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **3 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 108

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

экзамен 5

аудиторные занятия 51

самостоятельная работа 12

часов на контроль 45

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	5 (3.1)		Итого	
	Неделя 18			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	17	17	17	17
Практические	34	34	34	34
Итого ауд.	51	51	51	51
Контактная работа	51	51	51	51
Сам. работа	12	12	12	12
Часы на контроль	45	45	45	45
Итого	108	108	108	108

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

1.1	Цели освоения дисциплины - использовать основные методы теории химических связей для расчетов энергии взаимодействия в гетерополярных и гомеополярных молекулах, энергии кристаллической решетки твердых тел, сил и энергии межмолекулярного взаимодействия молекул между собой и твердыми телами. Уметь использовать в расчетах справочную литературу о свойствах молекул и кристаллов
1.2	
1.3	Задачи:
1.4	научить
1.5	1. анализировать литературу для поиска информации об отдельных определениях, понятиях, терминах и методах, используемых в квантовой механике и теории химической связи, свойствах атомов и молекул для решения теоретических типовых задач, связанных с дальнейшим обучением и профессиональной деятельностью ...
1.6	2. использовать методы квантовой механики и теории химической связи для анализа химической устойчивости молекул, их реакционной способности, энергии связи и энергии образования в ионных
1.7	вердых тел, сил и энергии межмолекулярного взаимодействия молекул между собой и твердыми телами. Уметь использовать в расчетах справочную литературу о свойствах молекул и кристаллов

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Блок ОП:		Б1.О
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Кристаллография	
2.1.2	Математическая статистика и анализ данных	
2.1.3	Методы математической физики	
2.1.4	Основы квантовой механики	
2.1.5	Теоретическая механика и основы теории упругости	
2.1.6	Учебная практика по получению первичных профессиональных умений	
2.1.7	Учебная практика по получению первичных профессиональных умений	
2.1.8	Физика	
2.1.9	Физическая химия	
2.1.10	Электротехника	
2.1.11	Математика	
2.1.12	Органическая химия	
2.1.13	Информатика	
2.1.14	Химия	
2.1.15	Инженерная и компьютерная графика	
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
2.2.1	Коллоидная химия	
2.2.2	Методы обработки статистических данных (анализ данных)	
2.2.3	Научно-исследовательская работа	
2.2.4	Научно-исследовательская работа	
2.2.5	Планирование и организация научно-исследовательской работы	
2.2.6	Физика конденсированного состояния	
2.2.7	Размерные эффекты в наноструктурных материалах	
2.2.8	Физико-химия наносистем	
2.2.9	Физические свойства твердых тел	
2.2.10	Методы контроля и анализа веществ	
2.2.11	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.12	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ОПК-1: Способен решать задачи профессиональной деятельности на основе применения естественнонаучных и общинженерных знаний, методов математического анализа и моделирования

Знать:

ОПК-1-32 физические и химические свойства молекул и ионных кристаллов
ОПК-1-31 теоретические модели и методы квантовой механики и теории химической связи для решения задач, связанных с описанием свойств гетероядерных и гомоядерных молекул, ионных кристаллов,
Уметь:
ОПК-1-У2 проводить расчеты реакционной способности атомов в молекуле, дипольного момента молекулы, энергии межмолекулярного взаимодействия,
ОПК-1-У3 анализировать литературу для поиска информации об отдельных определениях, понятиях, терминах и методах, используемых в квантовой механике и теории химической связи, свойствах атомов и молекул для решения теоретических типовых задач, связанных с дальнейшим обучением и профессиональной деятельностью
УК-1: Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, умение анализировать процессы и системы с использованием соответствующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов, применять системный подход для решения поставленных задач
Уметь:
УК-1-У1 осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации
ОПК-1: Способен решать задачи профессиональной деятельности на основе применения естественнонаучных и общинженерных знаний, методов математического анализа и моделирования
Уметь:
ОПК-1-У1 проводить расчеты энергии связи и энергии образования молекул и ионных кристаллов из атомов
Владеть:
ОПК-1-В1 методами расчетов энергии связи и образования молекул и ионных кристаллов из атомов