



## **I. Аннотация**

### **1. Наименование дисциплины в соответствии с учебным планом**

Расчетные методы квантовой механики молекул

### **2. Цель и задачи дисциплины**

Целью освоения дисциплины является:

ознакомление с основами теории строения молекул и с взаимосвязями «строение-свойство», а также с методами прогнозирования свойств

Задачами освоения дисциплины являются:

- 1) формирование представлений о развитии современных технологий, в том числе нанотехнологий, исследующих вещества и материалы на молекулярном уровне;
- 2) освоение новых методов и приемов в изучении физики отдельных молекул, базовых информационных технологий, позволяющих существенно повысить общий уровень усвоения физических знаний;
- 3) отработка навыков компьютерных расчетов и представления информации, владение пакетами прикладных программ.

### **3. Место дисциплины в структуре ООП**

Дисциплина относится к дисциплинам по выбору вариативной части учебного плана.

Для усвоения материала данной дисциплины, учащие должны понимать основы квантовой теории строения молекул и квантовой природы взаимосвязи свойств веществ со строением молекул.

Для успешного освоения дисциплины необходимо уверенно владеть математическим аппаратом в рамках курса алгебры и анализа, а также методами решения дифференциальных уравнений. Со стороны физики необходимо знать основы теоретической механики, квантовой механики и термодинамики. Теоретическими дисциплинами, для которых освоение данной дисциплины

необходимо как предшествующее являются дисциплины по углублению профессиональных компетенций.

#### 4. Объем дисциплины:

3 зачетных единицы, 108 академических часов, в том числе

**контактная работа:** лекции 22 часа, лабораторные работы 22 часа;

**самостоятельная работа:** 64 часа.

#### 5. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

<b>Формируемы компетенции</b>	<b>Требования к результатам обучения</b> В результате изучения дисциплины студент должен
ПК-1 способностью понимать принципы работы и методы эксплуатации современной радиоэлектронной и оптической аппаратуры и оборудования	<b>Владеть:</b> способностью использовать специализированные знания - владение пакетами прикладных программ. <b>Уметь:</b> применять компьютерные методы для расчетов разнообразнейшие свойства молекулярных систем. <b>Знать:</b> основы теории строения молекул, их внутренней структуры, основных свойств веществ
ОПК-2 способностью самостоятельно приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии	<b>Владеть:</b> умением анализировать взаимосвязи свойств веществ с позиций современных технологий, владеть вычислительным экспериментом. <b>Уметь:</b> применять компьютерные методы для расчетов разнообразнейшие свойства молекулярных соединений, а также применять методы прогнозирования их свойств, верифицировать полученные результаты с данными справочников. <b>Знать:</b> основы теории строения молекул, их внутренней структуры, основных свойств веществ, в том числе нанотехнологий, исследующих вещества и материалы на молекулярном уровне.

**6. Форма промежуточной аттестации экзамен в 8 семестре**

**7. Язык преподавания русский.**