

Специальность / Speciality: 6-05-0531-01 Химия / 6-05-0531-01 Chemistry

Учебная дисциплина, модуль / Academic discipline, module: Квантовая химия и строение молекул, Строение и исследование вещества / Quantum Chemistry and Structure of Molecules, Structure and Investigation of Matter

| Краткое содержание учебной дисциплины, модуля / Brief summary                        | <i>Вносится описание на русском языке</i>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | <i>Вносится описание на английском языке</i>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Формируемые компетенции / The formed competences                                     | Использовать понятийно-категориальный аппарат современной теории химического строения, включающий описание квантовых состояний молекул, симметрии молекулярных систем, строение конденсированных фаз (жидкостей, аморфных веществ, мезофаз, кристаллов) для описания их электрических, магнитных и оптических свойств                                                                                                                                                     | Use the conceptual and categorical apparatus of the modern theory of chemical structure, including a description of the quantum states of molecules, the symmetry of molecular systems, the structure of condensed phases (liquids, amorphous substances, mesophases, crystals) to describe their electrical, magnetic and optical properties                                                                                                                                                                                                                                  |
| Результаты обучения (знать, уметь, владеть) / Learning outcomes (know, can, be able) | <p>В результате изучения учебной дисциплины студент должен</p> <p><b>знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- основные постулаты квантовой механики;</li><li>- принципы квантово-механического описания многоэлектронных систем (атомов и молекул);</li><li>- природу химической связи и факторы, влияющие на ее прочность;</li><li>- о квантованных вращательных, колебательных и электронных состояниях молекул и их относительных энергиях как</li></ul> | <p>As a result of studying of the academic discipline, the student must</p> <p><b>know:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- basic postulates of quantum mechanics;</li><li>- principles of quantum mechanical description of multielectron systems (atoms and molecules);</li><li>- the nature of the chemical bond and factors influencing its strength;</li><li>- about quantized rotational, vibrational and electronic states of molecules and their relative energies as sources of information about molecular structure</li></ul> <p><b>be able to:</b></p> |

|                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                                                                     | <p>источниках информации о молекулярной структуре.</p> <p><b>уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- решать простейшие типовые задачи на базе соответствующих разделов курса;</li> <li>- строить диаграммы орбитальных энергий для простейших молекул и условные изображения атомных и молекулярных орбиталей;</li> </ul> <p><b>владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- методологией расчета длины связей, валентных углов, энергий диссоциации для двухатомных молекул из вращательных и колебательных спектров;</li> <li>- представлениями о современных методах расчета энергий и структурных параметров молекул</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>- solve the simplest standard problems based on the relevant sections of the course;</li> <li>- build diagrams of orbital energies for the simplest molecules and conventional images of atomic and molecular orbitals</li> </ul> <p><b>have skills in:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- methodology for calculating bond lengths, bond angles, dissociation energies for diatomic molecules from rotational and vibrational spectra;</li> <li>- ideas about modern methods for calculating energies and structural parameters of molecules</li> </ul> |
| Семестр изучения учебной дисциплины, модуля / Semester of study                                                                     | 5                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 5                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| Пререквизиты / Prerequisites                                                                                                        | Неорганическая химия, Физическая химия                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Inorganic Chemistry, Physical Chemistry                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| Трудоемкость в зачетных единицах (кредитах) / Credit units                                                                          | 3                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 3                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| Количество аудиторных часов и часов самостоятельной работы / Academic hour of students' class work, hours of self-directed learning | 74 / 46                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 74 / 46                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| Требования и формы текущей и промежуточной аттестации /                                                                             | Экзамен (устная форма)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Exam (oral form)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |

|                                                             |  |  |
|-------------------------------------------------------------|--|--|
| Requirements and forms of current and interim certification |  |  |
|-------------------------------------------------------------|--|--|