

Специальность / Speciality: 7-07-0531-02 Химия высоких энергий / 7-07-0531-02 High energy chemistry

Учебная дисциплина, модуль / Academic discipline, module: Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул, Компьютерная химия / Computer modeling of the structure and reactivity of molecules, Computer Chemistry

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	Решать профессиональные, научно-исследовательские и инновационные задачи на основе применения информационно-коммуникационных технологий Применять методы химической информатики, молекулярной динамики, компьютерного и математического моделирования для обоснованного описания структуры и свойств химических систем и их поведения в химических процессах	To solve professional, scientific research and innovative problems based on the use of information and communication technologies To apply methods of chemical informatics, molecular dynamics, computer and mathematical modeling to reasonably description of the structure and properties of chemical systems and their behavior in chemical processes
Результаты обучения (знать, уметь, владеть) / Learning outcomes (know, can, be able)	В результате изучения учебной дисциплины студент должен знать: – современные расчетные методы квантовой химии (неэмпирические, полуэмпирические и DFT); – стандартные базисные наборы, использующиеся при проведении неэмпирических и DFT расчетов; – методы учета электронной корреляции; методы учета влияния растворителя;	As a result of studying of the academic discipline, the student must know: – modern computational methods of quantum chemistry (non-empirical, semi-empirical and DFT); – standard basis sets used in non-empirical and DFT calculations; – methods for taking into account electron correlation; – methods for taking into account the influence of the solvent

	уметь: – с использованием программных пакетов для квантово-химических расчетов выполнять оптимизацию геометрии молекул; – рассчитывать индексы реакционной способности молекул; – рассчитывать структуры переходных состояний химических реакций; владеть: – методологией расчета молекулярных свойств, термодинамических и кинетических характеристик химических реакций; – современными программными пакетами для квантово-химических расчетов	be able to: – using software packages for quantum chemical calculations, perform optimization of the geometry of molecules; – calculate indices of the reactivity of molecules; – calculate the structures of transition states of chemical reactions; have skills in: – methodology for calculating molecular properties, thermodynamic and kinetic characteristics of chemical reactions; – modern software packages for quantum chemical calculations
Семестр изучения учебной дисциплины, модуля / Semester of study	10	10
Пререквизиты / Prerequisites	Неорганическая химия, Квантовая химия, Хемоинформатика	Inorganic Chemistry, Quantum Chemistry, Chemoinformatics
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	44 / 50	44 / 50
Требования и формы текущей и промежуточной аттестации / Requirements and forms of current and interim certification	Экзамен (устная форма)	Exam (oral form)

