

Специальность / Speciality: 6-05-0531-04 Химия (научно-педагогическая деятельность) / 6-05-0531-04 Chemistry (scientific and pedagogical activity)

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

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)	В результате изучения учебной дисциплины студент должен знать: - основные постулаты квантовой механики; - принципы квантово-механического описания многоэлектронных систем (атомов и молекул); - природу химической связи и факторы, влияющие на ее прочность; - о квантованных вращательных, колебательных и электронных состояниях молекул и их	As a result of studying of the academic discipline, the student must know: - basic postulates of quantum mechanics; - principles of quantum mechanical description of multielectron systems (atoms and molecules); - the nature of the chemical bond and factors influencing its strength; - about quantized rotational, vibrational and electronic states of molecules and their relative energies as sources of information about molecular structure

	относительных энергиях как источников информации о молекулярной структуре. уметь: - решать простейшие типовые задачи на базе соответствующих разделов курса; - строить диаграммы орбитальных энергий для простейших молекул и условные изображения атомных и молекулярных орбиталей; владеть: - методологией расчета длины связей, валентных углов, энергий диссоциации для двухатомных молекул из вращательных и колебательных спектров; - представлениями о современных методах расчета энергий и структурных параметров молекул	be able to: - solve the simplest standard problems based on the relevant sections of the course; - build diagrams of orbital energies for the simplest molecules and conventional images of atomic and molecular orbitals have skills in: - methodology for calculating bond lengths, bond angles, dissociation energies for diatomic molecules from rotational and vibrational spectra; - ideas about modern methods for calculating energies and structural parameters of molecules
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		
---	--	--