

Аннотация
к рабочей программе дисциплины «Строение неорганических веществ»

направление подготовки 04.03.01 Химия
направленность (профиль): Химия

Форма обучения: очная

1. Цель изучения дисциплины

Целью курса *Строение неорганических веществ* является формирование у студентов представлений об особенностях строения различных классов неорганических соединений и современных методах их компьютерного моделирования, а также получение практических навыков работы с современными квантовохимическими программными пакетами на удаленном вычислительном кластере.

Лекции содержат изложение теоретических основ современных представлений о строении неорганических веществ и методов расчета электронного строения, а также дополнительную информацию об особенностях реализации расчётных методов в различных популярных квантовохимических программных пакетах. На семинарах студенты обучаются работе с популярными квантовохимическими программными пакетами на вычислительном кластере Института неорганической химии СО РАН. Особенностью данного курса является более подробное, по сравнению с аналогичными курсами, изучение теории функционала плотности как инструмента, наиболее часто используемого на практике для расчета строения и свойств неорганических веществ, как молекул и молекулярных систем, так и кристаллов и низкоразмерных материалов. Кроме того, особое внимание уделено релятивистским эффектам в строении соединений тяжелых элементов и возможности учесть эти эффекты в квантовохимических расчетах.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина *Строение неорганических веществ* входит в Блок 1 дисциплин по выбору Б1.В.ДВ.1 и изучается в 7 семестре.

Дисциплина *Строение неорганических веществ* базируется на знаниях, умениях и навыках, сформированных у обучающихся по результатам изучения таких дисциплин как математический анализ, высшая алгебра, физика (электромагнитное излучение, кулоновское взаимодействие, квантовая механика, статистическая физика), неорганическая химия (строение и свойства атомов, периодический закон, строение молекул), физическая химия (природа химической связи в молекулах и кристаллах), строение вещества (электронные конфигурации атомов и ионов, гибридизация, электронные переходы). Результаты освоения дисциплины *Строение неорганических веществ* будут полезны для изучения таких дисциплин как «Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии», «Функциональные материалы», а также при прохождении научно-исследовательской практики.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Индикатор компетенции	Результаты обучения по дисциплине
Б-ОПК-1.	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений
Б-ОПК-1.1. Систематизирует и	-понимает фундаментальные физические основы взаимосвязи структуры и свойств неорганических веществ и материалов

анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	- <i>умеет</i> сопоставить результаты теоретических квантовохимических расчётов с доступными экспериментальными и литературными данными
Б-ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	
Б-ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	- <i>умеет</i> выполнять простые квантовохимические расчёты - <i>знает</i> , какие квантовохимические методы можно использовать для предсказания тех или иных свойств неорганических веществ
Б-ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	- <i>имеет</i> опыт работы в распространённых квантовохимических программных пакетах (Gaussian, ADF, DIRAC, Quantum-Espresso)
Б-ОПК-5. Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	
Б-ОПК-5.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля	- <i>использует</i> поиск в сети Интернет, на специализированных сайтах и в специальных базах данных для решения поставленных задач - <i>умеет</i> работать на современных вычислительных кластерах с помощью удаленного доступа по протоколу ssh - <i>знает</i> основные команды оболочки bash для навигации по файловой системе и работы с текстовыми файлами
Б-ОПК-5.2. Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности	- <i>умеет</i> работать на удалённом вычислительном кластере с соблюдением норм информационной безопасности
Б-ОПК-6. Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	
Б-ОПК-6.1. Представляет результаты работы в виде отчета по	- <i>имеет</i> опыт представления результатов квантовохимических расчётов в виде отчета по стандартной форме

стандартной форме на русском языке	
------------------------------------	--

4. Трудоемкость дисциплины, вид учебной деятельности и форма промежуточной аттестации

Трудоемкость дисциплины – 5 з.е. (180 ч)

Форма промежуточной аттестации: 7 семестр – экзамен

№	Вид деятельности	Семестр
		7
1	Лекции, ч	36
2	Практические занятия, ч	54
3	Лабораторные занятия, ч	
4	Занятия в контактной форме, ч из них	96
5	из них аудиторных занятий, ч	90
6	групповая работа с преподавателем, ч	
7	консультаций, час.	4
8	промежуточная аттестация, ч	2
9	Самостоятельная работа, час.	84
10	Всего, ч	180

5. Содержание дисциплины

- Раздел 1. *Строение небольших молекул. Расчеты ab initio.*
- Раздел 2. *Строение больших молекулярных систем. Теория функционала плотности.*
- Раздел 3. *Строение соединений тяжелых элементов. Релятивистская квантовая химия.*
- Раздел 4. *Строение кристаллов и низкоразмерных материалов. Периодические расчеты.*