

Аннотация
к рабочей программе дисциплины «Квантово-химические методы в катализе»

направление подготовки: 04.04.01 Химия
направленность (профиль): Химия

Форма обучения: очная

1. Цель изучения дисциплины

Дисциплина «Квантово-химические методы в катализе» предназначена для формирования представления о теоретических основах методов квантовой химии и навыков практического использования стандартных квантово-химических пакетов (типа Gaussian) для исследования электронной и геометрической структуры молекул и комплексов переходных металлов.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина *Квантово-химические методы в катализе* входит в часть образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.ДВ.1.13), и изучается в 2 семестре.

Освоение дисциплины *Квантово-химические методы в катализе* базируется на знаниях, умениях и навыках, сформированных у обучающихся по результатам изучения дисциплины Молекулярный дизайн катализаторов, и является необходимым для изучения следующих дисциплин и практик: Производственная практика, научно-исследовательская работа.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Индикатор компетенции	Результаты обучения по дисциплине
М-ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	
М-ОПК-1.3. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	<ul style="list-style-type: none"> - имеет представление о теории Хартри-Фока и теории функционала плотности DFT и численных методах решения уравнений самосогласованного поля для различных многоэлектронных систем; - имеет опыт расчетов молекул и комплексов в рамках пакета Gaussian; - имеет представление о круге задач в области исследования гетерогенных катализаторов, для которых возможно применение методов квантовой химии;

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

Трудоемкость дисциплины – 2 з.е. (72 ч)

Форма промежуточной аттестации: 2 семестр – экзамен

№	Вид деятельности	Семестр
		2
1	Лекции, ч	16
2	Практические занятия, ч	12
3	Лабораторные занятия, ч	-
4	Занятия в контактной форме, ч из них	32
5	из них аудиторных занятий, ч	28
6	в электронной форме, ч	-
7	консультаций, час.	2
8	промежуточная аттестация, ч	2
9	Самостоятельная работа, час.	40
10	Всего, ч	72

5. Содержание дисциплины

- Раздел 1. Квантовая химия в катализе
- Раздел 2. Практическое использование пакета Gaussian для расчета молекул