

## **Аннотация к рабочей программе дисциплины**

### **Б1.В.ДВ.7.2 «Теория химических взаимодействий»**

**Направление подготовки:** 18.03.01 Химическая технология

**Профиль подготовки:** Химическая технология природных энергоносителей  
и углеродных материалов

**Квалификация:** академический бакалавр

**Форма обучения:** очная

**Целью изучения дисциплины является** – усвоение студентами теоретических знаний о природе химической связи, методах расчета пространственной и электронной структуры молекул (в газовой фазе и растворах), а также твердых тел, приобретение умения анализировать результаты расчетов молекул и твердых тел.

**Задачи:** формирование основных представлений о природе химической связи, и овладение основами современных методов описания химической связи.

#### **Основные дидактические единицы (разделы):**

Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп). Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах. Квантовая химия молекул: основные принципы. Квантовая химия молекул: расчеты структур методом функционала плотности. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах". Расчеты структур молекул с учетом эффектов среды. Химическая связь в координационных соединениях. Электронная структура твердых тел. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий

#### **В результате изучения дисциплины «Теория химических взаимодействий»**

##### **студент должен знать:**

- основы геометрического и алгебраического подходов к теории симметрии для молекул и твердых тел;
- основы современных методов описания химической связи;
- представления об особенностях различных типов химической связи в газовой фазе и конденсированном состоянии.

##### **уметь:**

- анализировать данные расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях;
- ориентироваться в литературе, касающейся описания различных типов химической связи.

##### **владеть:**

- описания симметрии молекул и твердых тел;
- расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях.
- применять геометрический и алгебраический подходы к теории симметрии для характеристики молекул и твердых тел;
- использовать основы современных методов описания химической связи молекул, супрамолекулярных структур и твердых тел;
- обсуждать особенности различных типов химической связи в газовой фазе и конденсированном состоянии;
- анализировать данные расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях;
- ориентироваться в литературе, касающейся описания различных типов химической связи;
- рассчитывать параметры химической связи веществ в различных агрегатных состояниях.

**Приобретаемые компетенции:**

– использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире (ОПК-3).

**Виды учебной работы:** лекции, лабораторные работы, практические занятия.

**Общая трудоемкость дисциплины** составляет 5 ZE (180 часа, в том числе 18 ч – лек.; 36 ч – лаб.; 36 ч – практ.; 54 ч – СРС; 36 ч – контроль).

**Вид итоговой аттестации:** экзамен.