

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР

_____ Е.В. Коновалова

15 июня 2023 г., протокол УМС №5

МОДУЛЬ ОБЩЕПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ ДИСЦИПЛИН

Квантовая химия

рабочая программа дисциплины (модуля)

Закреплена за кафедрой **Химии**

Учебный план s040501-АнХим-23-1 РПД,plx
04.05.01 ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ

Квалификация **Химик. Преподаватель химии**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **4 ЗЕТ**

Часов по учебному плану	144	Виды контроля в семестрах: экзамены 6
в том числе:		
аудиторные занятия	84,3	
самостоятельная работа	14,7	
часов на контроль	45	

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	6 (3.2)		Итого	
	уп	рп	уп	рп
Неделя	17 5/6			
Вид занятий	уп	рп	уп	рп
Лекции	32	32	32	32
Практические	48	48	48	48
Контактная работа	4,3	4,3	4,3	4,3
В том числе инт.	36	36	36	36
Итого ауд.	84,3	84,3	84,3	84,3
Контактная работа	84,3	84,3	84,3	84,3
Сам. работа	14,7	14,7	14,7	14,7
Часы на контроль	45	45	45	45
Итого	144	144	144	144

Программу составил(и):

канд. хим. наук, Доцент, Цыро Лариса Васильевна

Рабочая программа дисциплины

Квантовая химия

разработана в соответствии с ФГОС:

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования - специалитет по специальности 04.05.01
Фундаментальная и прикладная химия (приказ Минобрнауки России от 13.07.2017 г. № 652)

составлена на основании учебного плана:

04.05.01 ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ

утвержденного учебно-методическим советом вуза от 15.06.2023 протокол № 5.

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры

Химии

Зав. кафедрой канд.биол.наук, доцент Сутормин Олег Сергеевич

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1	Целью изучения дисциплины «Квантовая химия» является обеспечение подготовки в области теоретических и расчетных методов современной химии. Квантовая химия, базируясь на основах квантовой механики, является современным инструментом теоретической химии, необходимым при обсуждении многих экспериментальных данных.
1.2	Задачи изучения дисциплины заключаются в овладении основами квантовой химии в приложении к решению химических задач, изучении развития методов расчета характеристик сложных молекул, их недостатков и приближений, понимании особенностей различных методов расчета квантовой химии и их возможных применений, а также освоении основных методов расчета для сложных молекул. Основное внимание уделяется не математическому аппарату, а физическому смыслу понятий квантовой химии и практическому овладению расчетными методами квантовой химии.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ООП:	Б1.О.04
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:
2.1.1	Физика
2.1.2	Математика
2.1.3	Информатика
2.1.4	Строение вещества
2.2	Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:
2.2.1	Спектроскопические методы
2.2.2	Кристаллохимия
2.2.3	Физическая химия
2.2.4	Физические методы исследования

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

ОПК-5.3: Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием

ОПК-3.1: Применяет теоретические и полумпирические модели при решении задач химической направленности

ОПК-3.2: Использует стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности

ОПК-1.1: Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов

ОПК-1.2: Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии

ОПК-1.3: Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

3.1	Знать:
3.1.1	основные понятия и постулаты квантовой механики
3.1.2	приближенные методы решения уравнения Шредингера;
3.1.3	номенклатуру, используемую при квантовомеханическом описании атомных и молекулярной систем и химических реакций;
3.1.4	особенности современных расчетов квантовой химии
3.2	Уметь:
3.2.1	решать простейшие задачи квантовой механики;
3.2.2	на основании результатов квантовомеханических расчетов охарактеризовать физические и химические свойства любой атомно-молекулярной системы;
3.2.3	рассчитывать свойства на заданном уровне развития теории и оценивать их соответствие экспериментальным данным
3.3	Владеть:
3.3.1	навыками вычисления электронного строения и энергии молекулы в рамках простого метода Хюккеля

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Компетенции	Литература	Примечание
	Раздел 1. Основные предпосылки квантовой механики					
1.1	Абсолютно черное тело. Внешний фотоэффект, соотношение Эйнштейна. Опыты Резерфорда, Девиссона и Джермера. Уравнение Луи де Бройля. Теория Бора. Уравнение Шредингера. /Лек/	6	5	ОПК-1.1 ОПК-1.2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
1.2	Квантовые постулаты Бора. Волновые свойства микрочастиц. Принцип неопределенностей. /Пр/	6	8	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
1.3	Зависимость физических величин от времени. Уравнение Шредингера. /Ср/	6	1,6	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
	Раздел 2. Некоторые математические формулы и					
2.1	Оператор. Свойства квантово-механических операторов. Спектры операторов. Собственные функции. Операторы координат. Оператор импульса. Оператор энергии. Произведение векторов. Момент импульса. Критерий возможности одновременного измерения двух физических величин на языке операторов. Коммутаторы операторов. Примеры коммутаторов, коммутационные соотношения. Математические ожидания. Средние значения. Законы сохранения и стационарные состояния. /Лек/	6	8	ОПК-1.1 ОПК-1.2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
2.2	Операторы и их свойства. Операторы физических величин. Собственные функции и собственные значения операторов. Принцип неопределенности в операторном виде. /Пр/	6	14	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
2.3	Момент импульса. Сферические функции. /Ср/	6	3	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
	Раздел 3. Задачи, решаемые аналитически					

3.1	Свободная частица. Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно-высокими стенками. Частица в потенциальном ящике, вырожденные состояния. Жесткий ротатор. Линейный гармонический осциллятор. Атом водорода. /Лек/	6	8	ОПК-1.1 ОПК-1.2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
3.2	Волновая функция. Расчет средних значений. Частица в потенциальной яме. Водородоподобный атом. /Пр/	6	14	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.1 ОПК-5.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
3.3	Одномерное движение. /Ср/	6	4,1	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.1 ОПК-5.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
Раздел 4. Методы квантовой химии						
4.1	Многочастичные системы. Принцип антисимметрии. Детерминант Слейтера. Вариационный метод. Вариационный метод Рунда. Теория возмущений (вырожденные и невырожденные состояния). Метод Хартри-Фока. Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод МО	6	11	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-3.2 ОПК-5.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
4.2	Вариационный метод. Метод МО. /Пр/	6	12	ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-5.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
4.3	Теория возмущений. /Ср/	6	6	ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-5.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
4.4	/КонР/	6	4,3			
4.5	/Контр.раб./	6	2			Контрольная работа
4.6	/Экзамен/	6	43	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-5.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Л3.3 Л3.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	Экзамен

5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

5.1. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации

Представлены отдельным документом

5.2. Оценочные материалы для диагностического тестирования

Представлены отдельным документом

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**6.1. Рекомендуемая литература****6.1.1. Основная литература**

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л1.1	Степанов Н. Ф.	Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. Часть 2: Учебник и практикум	Москва: Издательство Юрайт, 2018, электронный ресурс	1
Л1.2	Ермаков А. И.	Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. Часть 1: Учебник и практикум	Москва: Издательство Юрайт, 2019, электронный ресурс	1
Л1.3	Ермаков А. И.	Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. Часть 2: Учебник и практикум	Москва: Издательство Юрайт, 2019, электронный ресурс	1
Л1.4	Ермаков А. И.	Квантовая механика и квантовая химия: Учебник и практикум	Москва: Издательство Юрайт, 2017, электронный ресурс	1

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л2.1	Цирельсон В.Г.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела	Moscow: БИНОМ, 2014, электронный ресурс	1
Л2.2	Цирельсон В.Г.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела	Moscow: Лаборатория знаний, 2014, электронный ресурс	1

6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л3.1	Барановский В. И.	Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по химическим специальностям	М.: Академия, 2008	5

ЛЗ.2	Парфенов П.С.	Квантовая механика: учебно-методическое пособие	Санкт-Петербург: Университет ИТМО, 2012, электронный ресурс	1
ЛЗ.3	Цыро Л. В., Пичугина А. А.	Квантовая механика и квантовая химия в примерах и задачах: учебно-методическое пособие	Сургут: Издательский центр СурГУ, 2018, электронный ресурс	2
ЛЗ.4	Цыро Л. В., Пичугина А. А.	Квантовая механика и квантовая химия в примерах и задачах: учебно-методическое пособие	Сургут: Издательский центр СурГУ, 2018	35
6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"				
Э1	ACS Publications			
Э2	Учебники, практикумы и справочники по химии и токсикологической химии			
Э3	Электронная библиотека диссертаций			
Э4	Портал фундаментального химического образования России			
Э5	Химия во всех проявлениях			
Э6	Издания по естественным и техническим наукам			
Э7	Базы структурного поиска Reaxys			
6.3.1 Перечень программного обеспечения				
6.3.1.1	Операционная система Microsoft Windows, пакет прикладных программ Microsoft Office			
6.3.2 Перечень информационных справочных систем				
6.3.2.1	Национальная электронная библиотека - нэб.рф;			
6.3.2.2	Электронные книги Springer Nature (Science, Technology and Medicine Collections) - https://link.springer.com ;			
6.3.2.3	Гарант-информационно-правовой портал - http://www.garant.ru ;			
6.3.2.4	КонсультантПлюс - надежная правовая поддержка - http://www.consultant.ru			
7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)				
7.1	Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа (практических занятий), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации оснащены: типовой учебной мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации			