

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Забайкальский государственный университет»
(ФГБОУ ВО «ЗабГУ»)

Энергетический факультет

Кафедра Химии

УТВЕРЖДАЮ:

Декан факультета

Мирошников С.Ф.

« ____ » _____ 20 ____ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.04.Квантовая химия и квантовая механика

на 144 часа(ов), 4 зачетных(ые) единиц(ы)

для направления подготовки (специальности) 04.03.01– Химия

составлена в соответствии с ФГОС ВО, утвержденным приказом
Министерства образования и науки Российской Федерации от
« ____ » _____ 20 ____ г. № _____

Профиль – Химия (для набора 2019)

Форма обучения очная

1. Организационно-методический раздел

1.1 Цель и задачи дисциплины (модуля)

Цель изучения дисциплины:

формирование у студентов знаний и умений использовать основные законы и модели квантовой химии и механики, средств и способов изучения явлений микромира, уметь использовать теоретические знания при объяснении результатов химических экспериментов.

Задачи изучения дисциплины:

изучение основных постулатов квантовой механики; изучение приближенных методов решения квантовомеханических задач; изучение электронного строения молекул; решение прикладных задач квантовой химии.

1.2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОП

Дисциплина «Квантовая химия и квантовая механика» относится к обязательным дисциплинам вариативной части профессионального цикла ООП. Для успешного освоения дисциплины студент должен иметь базовую подготовку по _дисциплинам «Математика», «Физика»_ в объеме программы ВУЗа. В свою очередь, дисциплина «Квантовая химия и квантовая механика» служит информационной и методологической основой для дальнейшего изучения таких дисциплин как «Строение вещества», «Физические методы исследования». Дисциплина изучается на _3_ курсе в _5_ семестре.

1.3. Объем дисциплины (модуля) с указанием трудоемкости всех видов учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины (модуля) составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы), 144 часов.

Очная форма

Виды занятий	Распределение по семестрам	
	5 семестр	Всего часов
Общая трудоемкость		144
Аудиторные занятия, в т.ч.	51	51
лекционные (ЛК)	34	34
практические (семинарские) (ПЗ, СЗ)	17	17
лабораторные (ЛР)	0	0
Самостоятельная работа студентов (СРС)	57	57
Форма промежуточной аттестации в семестре	Экзамен	36
Курсовая работа (курсовой проект) (КР, КП)		

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы		Планируемые результаты обучения по дисциплине
Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции, формируемые в рамках дисциплины	Дескрипторы: знания, умения, навыки и (или) опыт деятельности
ОПК-6. Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе.	ОПК-6.1. Знает основные требования к представлению результатов работ в профессиональной сфере деятельности; структуру научного доклада (название, обоснование актуальности работы, цель работы, задачи, состояние вопроса, основные результаты и выводы).	Знать: неэмпирические и полуэмпирические методы для количественного (полуколичественного) описания электронного строения молекул в виде кратких отчетов и презентаций. Уметь: раскрыть основные постулаты квантовой механики в виде кратких отчетов и презентаций. Владеть: методами квантовой химии для расчета для конкретной химической задачи
	ОПК-6. Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе.	ОПК-6.2. Умеет использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу; оформить отчет или научную публикацию с использованием новых информационных технологий.

<p>ПК-1. Способен использовать знания о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, веществ и материалов для понимания механизма химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, математические и естественнонаучные знания для решения задач профессиональной деятельности</p>	сообществе.	<p>ПК-1.1. Знает основные принципы, законы, положения, методологию изучаемых дисциплин.</p>	<p>Знать: основные постулаты квантовой механики при анализе произвольной молекулярной системы. Уметь: написать уравнение Шредингера для произвольной молекулярной системы и провести разделение его на составные части. Владеть: методологией групп симметрии.</p>
	<p>ПК-1. Способен использовать знания о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, веществ и материалов для понимания механизма химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, математические и естественнонаучные знания для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>ПК-1.2. Умеет использовать основные законы и положения химии для описания строения и свойств веществ.</p>	<p>Знать: методы квантовой химии и квантовой механики при решении задач неорганической, органической химии, высокомолекулярных соединений, химической технологии. Уметь: дать квантовохимическое описание элементарного акта химической реакции при решении профессиональных задач. Владеть: анализом неэмпирических и полумэмпирических методов для количественного (полуколичественного) описания электронного строения молекул (по отдельным классам соединений).</p>

3. Структура и содержание дисциплины

3.1. Разделы дисциплины и виды занятий

3.1 Структура дисциплины для очной формы обучения

Модуль	Номер раздела	Наименование раздела	Темы раздела	Всего часов	Аудиторные занятия			СРС
					ЛК	ПЗ (СЗ)	ЛР	

1	1	Введение и основы квантовой теории	Классическая и квантовая механики	18	9	4	0	5
			Двойственная природа электромагнитного излучения	12	4	2	0	6
2	2	Квантовая теория строения молекул	Операторы и волновое уравнение	19	6	3	0	10
			Волновая функция	23	8	3	0	12
3	3	Квантовая теория химической связи	Молекулярные орбитали и валентные связи	15	4	3	0	8
			Полуэмпирические методы	15	4	3	0	8
4	4	Квантовая теория химических реакций	Теория скорости и координата реакции	15	4	3	0	8
Итого				117	39	21	0	57

3.4. Содержание разделов дисциплины

3.4.1. Лекционные занятия, содержание и объем в часах

Модуль	Номер раздела	Тема	Содержание	Трудоемкость (в часах)
				ОФО
1	1	Введение. Классическая и квантовая механики.	Происхождение квантовой теории. Квантовая механика и квантовая химия. Причины образования химической связи. Химическое превращение с точки зрения квантовой механики.	1
	1	Двойственная природа электромагнитного излучения	Энергия и импульс квантов электромагнитного излучения. Законы сохранения. Излучение черного тела. Явление фотоэффекта. Волны де Бройля и их статистическое толкование. Вероятность нахождения микрочастиц.	2
	1	Статистические ансамбли.	Явление дифракции микрочастиц на узлах кристаллической решетки. Принцип суперпозиции состояний. Соотношение неопределенности Гейзенберга. Роль измерительного прибора.	2

	2	Понятие оператора и его свойства.	Собственные функции и собственные значения операторов. Матричное представление. Операторы координаты и импульса микрочастицы, момента импульса и его квадрата. Оператор энергии и функция Гамильтона. Спин электрона. Оператор спина.	2
2	2	Постулаты квантовой механики.	Первый, второй и третий постулаты квантовой механики. Волновое уравнение.	2
	2	Взаимодействие вещества с электромагнитным излучением.	Свободная частица. Частица в потенциальной яме. Туннельный эффект. Линейный гармонический осциллятор.	2
	2	Волновое уравнение для атома водорода	Решение уравнения гармонических колебаний. Решение уравнений Лежандра, Лягера. Квантовые числа. Атомные волновые функции. Плотность вероятности радиальной составляющей.	2
	2	Волновая функция многоэлектронных атомных систем.	Детерминант Слейтера. Запрет Паули. Приближенные методы решения уравнения Шредингера. Вариационный метод. Порядок заполнения энергетических уровней электронами.	2
3	2	Векторная модель атома.	Термы многоэлектронных атомов. Спин-орбитальное и электронно-ядерное магнитное взаимодействие. Правила отбора в атомной спектроскопии. Многоэлектронный атом в магнитном поле.	2
	2	Методы квантовой механики.	Метод самосогласованного поля Хартри. Метод Хартри-Фока, Рутана. Молекулы с закрытыми и открытыми оболочками. Выбор функций базисного набора.	2
	2	Электронные переходы в молекулах	Энергия ионизации. Теорема Купмана. Электронная корреляция. Конфигурационное взаимодействие.	2
	3	Молекулярные орбитали и термы.	Гомоядерные молекулы элементов первого и второго периодов. Гетероядерные молекулы. Линейные многоядерные молекулы.	2
	3	Электронная структура нелинейных молекул.	Метод валентных связей. Методы псевдопотенциала.	2

4	3	Основы метода Гюккеля.	Параметры электронной структуры молекулярных образований. Ароматичность. Правило Гюккеля	2
	3	Полуэмпирические методы.	Приближения Малликена, Попла. Метод полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием.	2
	4	Теория скорости химических реакций	Индексы химической реакционной способности. Метод молекулярного электростатического потенциала. Энергия локализации. Комплекс Уолленда.	2
	4	Пространственное строение микрочастиц.	Химическое превращение и координата реакции. Орбитальная энергия и молекулярная электронная спектроскопия. Межмолекулярное взаимодействие.	2

3.4.2. Практические занятия, содержание и объем в часах

Модуль	Номер раздела	Тема	Содержание	Трудоемкость (в часах)
				ОФО
1	1	Введение и основы квантовой теории	Решение задач по теме «Операторы в квантовой химии».	2
	2	Квантовая теория строения молекул	Решение простейших квантово-химических задач: частица в одномерном ящике, частица в трехмерном ящике	2
2	2	Квантовая теория строения молекул	Построение АО с заданными значениями квантовых чисел с использованием формул Лежандра и Ланжевена	2
	2	Квантовая теория строения молекул	Расчет допустимых состояний многоэлектронного атома. Правила Хунда. Спектры многоэлектронных атомов.	2
3	3	Квантовая теория химической связи	Расчеты экранирования заряда ядра по правилам Слэттера. Определение термов многоэлектронных атомов. Расчет квантовых чисел многоэлектронных систем.	2
	3	Квантовая теория химической связи	Оценка перекрывания АО при изменении расстояния. Симметрия АО и МО. Определение электронных формул гомонуклеарных молекул по методу молекулярных орбиталей: первого периода и второго периода.	2

	3	Квантовая теория химической связи	Решение задач по методу Хюккеля для сопряженных углеводородов. Построение матрицы плотности.	2
4	4	Квантовая теория химических реакций	Определение возможности протекания термических или фотохимических реакций по правилам орбитальной симметрии (метод Дьюара, Метод Вудворда-Гофмана).	2
	4	Квантовая теория химических реакций	Взаимодействия ВЗМО – НСМО.	1

3.4.3. Лабораторные занятия, содержание и объем в часах

Модуль	Номер раздела	Тема	Содержание	Трудоемкость (в часах)
				ОФО

3.6. Самостоятельная работа студентов

Модуль	Номер раздела	Содержание материала, выносимого на самостоятельное изучение	Виды самостоятельной работы	Трудоемкость (в часах)
				ОФО
1	1	Основные этапы развития квантовой теории. Квантовая теория света Планка – Эйнштейна. Квантовые числа. Матричная механика.	Составление конспекта; подготовка сообщений и докладов	4
1	1	Линейные и самосопряженные (эрмитовы) операторы. Собственные функции и собственные значения операторов. Матричное представление операторов.	Составление конспекта. Выполнение домашних контрольных работ	7
2	2	Волновая функция как функция состояния системы; ее физический смысл. Волновая функция системы частиц (бозонов и фермионов). Принцип тождественности частиц.	Подготовка электронных презентаций. Работа с электронными образовательными ресурсами.	5
2	2	Квантование момента импульса. Собственные значения и собственные функции. Сложение моментов. Векторная модель.	Составление конспекта. Выполнение домашних контрольных работ.	5
2	2	Частица в потенциальном ящике. Гармонический осциллятор. Жесткий ротатор. Задача об атоме водорода. Энергия атома.	Составление конспекта. Выполнение домашних контрольных работ.	6

2	2	Теории ВС и МО. Самосогласованное поле (ССП). Метод Хартри-Фока (ХФ).	Составление конспекта. Выполнение домашних контрольных работ.	6
3	3	Полуэмпирические расчеты. Простой метод Хюккеля (МОХ), расширенный метод Хюккеля (РМХ), метод Паризера - Парра - Попла (ППП). Приближение нулевого дифференциального перекрытия (НДП). Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрытием (ПДДП, МПДП).	Работа с компьютерными моделями. Работа с электронными образовательными ресурсами.	6
3	3	Неэмпирические расчеты (ab initio). Методы МО ЛКАО ССП, МО ЛКАО ССП КВ	Работа с компьютерными моделями. Работа с электронными образовательными ресурсами.	5
3	3	Электронное строение органических соединений. Принципы построения аддитивных схем расчета.	Работа с компьютерными моделями. Работа с электронными образовательными ресурсами. Обработка и анализ полученных данных.	5
4	4	Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности в элементарном акте химической реакции. Переходное состояние. Корреляционные правила Вудворда-Хофмана. Теория граничных орбиталей Фукуи	Работа с компьютерными моделями. Работа с электронными образовательными ресурсами. Обработка и анализ полученных данных.	8

4. Фонд оценочных средств для проведения текущей и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Фонд оценочных средств текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины представлен в приложении.

[Фонд оценочных средств](#)

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Основная литература

5.1.1. Печатные издания

1. Харченко, Валерий Иванович. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособие / Харченко Валерий Иванович, Шамонин Виктор Александрович. - Чита : ЧитГУ, 2006. - 138с.

+ эл. версия

2. Татевский, Владимир Михайлович. Классическая теория строения молекул и квантовая механика / Татевский Владимир Михайлович. - Москва : Химия, 1973. - 520 с.

5.1.2. Издания из ЭБС

3. Степанов, Николай Федорович. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. Часть 1 : Учебник и практикум / Степанов Николай Федорович; Степанов Н.Ф. - 2-е изд. - М. : Издательство Юрайт, 2017. - 233. - (Бакалавр. Академический курс).

4. Ермаков, Алексей Иванович. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. Часть 1 : Учебник и практикум / Ермаков Алексей Иванович; Ермаков А.И. - М. : Издательство Юрайт, 2017. - 183. - (Бакалавр. Академический курс).

5. Ермаков, Алексей Иванович. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. Часть 2 : Учебник и практикум / Ермаков Алексей Иванович; Ермаков А.И. - М. : Издательство Юрайт, 2017. - 402. - (Бакалавр. Академический курс).

6. Ермаков, Алексей Иванович. Квантовая механика и квантовая химия : Учебник и практикум / Ермаков Алексей Иванович; Ермаков А. И. - М. : Издательство Юрайт, 2016. - 555. - (Бакалавр. Академический курс).

7. Степанов, Николай Федорович. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. Часть 2 : Учебник и практикум / Степанов Николай Федорович; Степанов Н.Ф. - 2-е изд. - М. : Издательство Юрайт, 2016. - 283. - (Бакалавр. Академический курс)

5.2. Дополнительная литература

5.2.1. Печатные издания

8. Мак-Вини, Р. Квантовая механика молекул / Р. Мак-Вини, Б. Саттлиф; пер. с англ. Б.М. Давидовича, Т.Б. Князевской; под ред. В.В. Толмачева. - Москва : Мир, 1972. - 380 с.

5.2.2. Издания из ЭБС

9. Милантьев, Владимир Петрович. Атомная физика : Учебник и практикум / Милантьев Владимир Петрович; Милантьев В.П. - 2-е изд. - М. : Издательство Юрайт, 2017. - 415. - (Бакалавр. Академический курс).

10. Ермаков, Алексей Иванович. Квантовая механика и квантовая химия : Учебник и практикум / Ермаков Алексей Иванович; Ермаков А. И. - М. : Издательство Юрайт, 2016. - 555. - (Бакалавр. Академический курс).

5.3. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

11. MOLCAS - Режим доступа: <http://www.molcas.org/introduction.html>

12. PC_GAMESS-Firefly - Режим доступа: http://www.freechemical.info/freeSoftware/PC_

13. GAMESS-Firefly.html Gaussian 09 - Режим доступа: <http://www.gaussian.com/>

14. TURBOMOLE - Program Package for ab initio Electronic Structure Calculations - <http://www.turbomole.com/>

15. NWChem - Режим доступа: http://www.nwchem-sw.org/index.php/Main_Page

16. Химический портал Chemport.ru. - Режим доступа: <http://chemport.ru/>

17. Сайт о квантовой химии. - Режим доступа: <http://qchem.ru>

18. Расширение пределов компьютерной химии. - Режим доступа: <http://gaussian.com>

19. Электронная библиотека учебных материалов по химии портала фундаментального химического образования России ChemNet. - Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/>

6. Перечень программного обеспечения

Программное обеспечение общего назначения: ОС Microsoft Windows, Microsoft Office, ABBYY FineReader, ESET NOD32 Smart Security Business Edition, Foxit Reader, АИБС "МераПро".

Программное обеспечение специального назначения: Adobe Flash, ABBYY FineReader, Mathematica Standart Version Education, 7-Zip, Google Chrome, Kaspersky Endpoint Security

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Наименование помещений для проведения учебных занятий и для самостоятельной работы обучающихся	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы
Учебные аудитории для курсового проектирования(выполнения курсовых работ)	Состав оборудования и технических средств обучения указан в паспорте аудитории, закрепленной расписанием по кафедре
Учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций	
Учебные аудитории для текущей аттестации	
Помещение для самостоятельной работы	

8. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Для чтения лекций и проведения семинарских занятий необходимо наличие аудиторий, оснащенных мультимедийной техникой (компьютер, проектор и др.). Для самостоятельной работы студентов необходим доступ в компьютерный класс, имеющий выход в Интернет. Для освоения дисциплины «Квантовая химия и квантовая механика» необходимо:

- самостоятельное изучение учебной литературы по теоретическим вопросам, рассматриваемым на лекциях и семинарских занятиях;
- систематическое отслеживание межпредметных связей (потенциальные приложения изучаемого материала к проблемам основных разделов химии — неорганической, органической, физической, аналитической);
- систематическое решение всех типов контрольных задач, рассматриваемых на семинарских занятиях;
- поиск учебной и справочной информации в сети «Интернет».

Разработчик/группа разработчиков: Дабижа Ольга Николаевна, доцент

**Рассмотрена на заседании кафедры
(протокол от 02.09.2019 г. № 1)**

Согласована с выпускающей кафедрой

Заведующий кафедрой

« ____ » _____ 20__ г.