

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Сыров Игорь Анатольевич
Должность: Директор
Дата подписания: 30.10.2023 13:43:19
Уникальный программный ключ:
b683afe664d7e9f64175886cf9626a196149ad36

СТЕРЛИТАМАКСКИЙ ФИЛИАЛ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»

Факультет
Кафедра

Естественнонаучный
Химии и химической технологии

Аннотация рабочей программы дисциплины (модуля)

дисциплина

Б1.О.26 Квантовая химия

обязательная часть

Направление

04.03.01

Химия

код

наименование направления

Программа

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Для поступивших на обучение в
2023 г.

Стерлитамак 2023

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций

Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Обучающийся должен: знать основы теории строения молекул, их внутренней структуры, основных свойств веществ, в том числе нанотехнологий, исследующих вещества и материалы на молекулярном уровне
	ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Обучающийся должен: уметь выбирать метод расчета для конкретной химической задачи, владеть методологией групп симметрии, применять компьютерные методы для расчетов разнообразнейших свойств молекулярных систем, а также применять методы прогнозирования их свойств, верифицировать полученные результаты с данными справочников
	ОПК-3.3. Применяет расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Обучающийся должен: владеть умением анализировать взаимосвязи свойств веществ с позиций современных технологий, владеть вычислительным экспериментом
ОПК-5. Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-5.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля	Обучающийся должен: знать границы применимости классической механики и квантовой химии и её связь с квантовой теорией, физическое содержание фундаментальных принципов квантовой механики и квантовой химии, основные уравнения и основные модели квантовой механики и квантовой химии, свойства уравнения Шредингера, свойства оператора углового момента, иметь представление о методах теории групп, применяемых для

		изучения симметрий квантовых состояний
	ОПК-5.2. Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности	Обучающийся должен: уметь показать преемственность ключевых тем классической и квантовой механики и химии, связь симметрий с законами сохранения; уметь применять теоретический материал к решению задач, используя математический аппарат квантовой механики, применять уравнение Шредингера для исследования состояний частицы в сферически симметричном поле, квантового гармонического осциллятора, электрона в атоме водорода с помощью современных компьютерных технологий
	ОПК-5.3. Понимает принципы работы современных информационных технологий	Обучающийся должен: владеть навыками решения задач, основанных на практическом применении изучаемого материала, в особенности на применении уравнения Шредингера (основного уравнения квантовой механики) с применением современных компьютерных технологий

2. Цели и место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Цели изучения дисциплины:

- формирование основ современной теоретической химии, ознакомление с квантово-механическими методами описания химических систем (атомов, молекул, кристаллов) и реакций.
- изучение студентами основ квантовой механики в приложении к решению химических задач, а также теоретических и расчетных методов квантовой химии. Основное внимание уделяется не математическому аппарату, а расшифровке физического смысла понятий квантовой механики и квантовой химии и практическому овладению расчетными методами квантовой химии.

Дисциплина изучается на 4 курсе в 7 семестре

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 3 зач. ед., 108 акад. ч.

Объем дисциплины	Всего часов
	Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины	108
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	16
практических (семинарских)	58
другие формы контактной работы (ФКР)	0,2
Учебных часов на контроль (включая часы подготовки):	
дифференцированный зачет	
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	33,8

Формы контроля	Семестры
дифференцированный зачет	7

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)

№ п/п	Наименование раздела / темы дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)			
		Контактная работа с преподавателем			СР
		Лек	Пр/Сем	Лаб	
1	Основные понятия квантовой механики и квантовой химии	16	58	0	33,8
1.1	Основные понятия квантовой механики	1	16	0	3
1.2	Постулаты квантовой механики	2	0	0	3
1.3	Решение уравнения Шредингера	2	0	0	3
1.4	Решение уравнения Шредингера для атома водорода	1	0	0	3
1.5	Атомные орбитали	2	0	0	1,8
1.6	Квантовые числа	2	12	0	3
1.7	Свойства многоэлектронных атомов	1	12	0	3
1.8	Механическая и классическая модели атомов	1	0	0	3
1.9	Поверхность потенциальной энергии	1	0	0	3
1.10	Многоэлектронные атомы	1	0	0	3
1.11	Симметрия молекулярных систем	2	18	0	5

	Итого	16	58	0	33,8
--	--------------	-----------	-----------	----------	-------------

4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам (темам)

Курс лекционных занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
1	Основные понятия квантовой механики и квантовой химии	
1.1	Основные понятия квантовой механики	Принцип неопределенностей. Волновая функция. Операторы. Свойства операторов. Собственные функции и собственные значения. Самосопряженный или эрмитов оператор.
1.2	Постулаты квантовой механики	Операторы физических величин. Постулаты квантовой механики: о волновой функции, о способе описания физических величин, об основном уравнении квантовой механики, о возможных значениях физических величин, принцип суперпозиции, об антисимметричности волновой функции
1.3	Решение уравнения Шредингера	Одномерное движение свободной частицы. Движение частицы в одномерной потенциальной яме. Трехмерное движение частицы. Одномерный потенциальный барьер.
1.4	Решение уравнения Шредингера для атома водорода	Уравнение Шредингера для атома водорода.
1.5	Атомные орбитали	Классификация атомных орбиталей. Пространственная структура атомных орбиталей. Радиальная функция распределения.
1.6	Квантовые числа	Главное квантовое число. Угловые моменты атома. Операторы. Орбитальное квантовое число. Спин электрона.
1.7	Свойства многоэлектронных атомов	Энергетические уровни. Периодическая система элементов. Потенциалы ионизации атомов. Квантовые числа многоэлектронного атома. Полные орбитальные и спиновые квантовые числа. Спинорбитальное взаимодействие. Термы атомов в приближении спин-орбитального взаимодействия. Спектры многоэлектронных атомов
1.8	Механическая и классическая модели атомов	Внутренние координаты, используемые для описания структуры молекул и атомных взаимодействий. Теория химической связи.
1.9	Поверхность потенциальной энергии	Свойства ППЭ. Стационарная точка. Гессиан. Матрица гессиана (локальный минимум, локальный максимум, седловая точка, глобальный минимум). Энергетический барьер ППЭ.
1.10	Многоэлектронные атомы	Неэмпирические и полуэмпирические методы. Вариационный принцип. Метод самосогласованного поля. Метод Хартри-Фока. Взаимодействия в молекулах.
1.11	Симметрия молекулярных систем	Операции симметрии. Точечные группы симметрии молекул. Орбитальная симметрия.

Курс практических/семинарских занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
1	Основные понятия квантовой механики и квантовой химии	
1.1	Основные понятия квантовой механики	Решение заданий по феноменологическим основам квантовой механики.
1.6	Квантовые числа	Решение заданий на нахождение значений квантовых чисел
1.7	Свойства многоэлектронных атомов	Решение заданий на нахождение термов. Нахождение состояния полного орбитального момента
1.11	Симметрия молекулярных систем	Определение симметрии молекул. Определение операции симметрии и точечных групп.