

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Сыров Игорь Анатольевич
Должность: Директор
Дата подписания: 28.06.2022 09:24:48
Уникальный программный ключ:
b683afe664d7e9f64175886cf9626a196149ad56

СТЕРЛИТАМАКСКИЙ ФИЛИАЛ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет
Кафедра

Естественнонаучный
Химии и химической технологии

Рабочая программа 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
2020 г.

Разработчик (составитель)

к.х.н., доцент

Колчина Г. Ю.

ученая степень, должность, ФИО

Стерлитамак 2022

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций	3
2. Цели и место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы	4
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	5
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.....	5
4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах).....	5
4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам (темам)	6
5. Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю).....	7
6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)	8
6.1. Перечень учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)	8
6.2. Перечень электронных библиотечных систем, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем	8

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-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
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

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)				СР
		Контактная работа с преподавателем				
		Лек	Пр/Сем	Лаб		
1	Основные понятия квантовой механики и квантовой химии	16	58	0	33,8	
1.6	Квантовые числа	2	12	0	3	
1.11	Симметрия молекулярных систем	2	18	0	5	
1.10	Многочастицинные атомы	1	0	0	3	
1.9	Поверхность потенциальной энергии	1	0	0	3	
1.8	Механическая и классическая модели атомов	1	0	0	3	
1.7	Свойства многочастиципных атомов	1	12	0	3	
1.5	Атомные орбитали	2	0	0	1,8	
1.4	Решение уравнения Шредингера для атома водорода	1	0	0	3	
1.3	Решение уравнения Шредингера	2	0	0	3	
1.2	Постулаты квантовой механики	2	0	0	3	
1.1	Основные понятия квантовой механики	1	16	0	3	

	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	
1.6	Квантовые числа	Главное квантовое число. Угловые моменты атома. Операторы. Орбитальное квантовое число. Спин электрона.
1.11	Симметрия молекулярных систем	Операции симметрии. Точечные группы симметрии молекул. Орбитальная симметрия.
1.10	Многоэлектронные атомы	Неэмпирические и полуэмпирические методы. Вариационный принцип. Метод самосогласованного поля. Метод Хартри-Фока. Взаимодействия в молекулах.
1.9	Поверхность потенциальной энергии	Свойства ППЭ. Стационарная точка. Гессиан. Матрица гессиана (локальный минимум, локальный максимум, седловая точка, глобальный минимум). Энергетический барьер ППЭ.
1.8	Механическая и классическая модели атомов	Внутренние координаты, используемые для описания структуры молекул и атомных взаимодействий. Теория химической связи.
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
1.5	Атомные орбитали	Классификация атомных орбиталей. Пространственная структура атомных орбиталей. Радиальная функция распределения.
1.4	Решение уравнения Шредингера для атома водорода	Уравнение Шредингера для атома водорода.
1.3	Решение уравнения Шредингера	Одномерное движение свободной частицы. Движение частицы в одномерной потенциальной яме. Трехмерное движение частицы. Одномерный потенциальный барьер.
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
1.1	Основные понятия квантовой механики	Принцип неопределенностей. Волновая функция. Операторы. Свойства операторов. Собственные функции и собственные значения. Самосопряженный или эрмитов оператор.

Курс практических/семинарских занятий

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

5. Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Перечень тем, рекомендуемых для самостоятельного изучения:

1. Тема Волновая функция системы частиц (бозонов и фермионов).
2. Тема Приближение нулевого дифференциального перекрывания (НДП). Методы ППДП/1, ППДП/2, ППДП/С; ЧПДП, МЧПДП/1, МЧПДП/2, МЧПДП/3, ЗЧПДП/1, ЗЧПДП/С. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием (ПДДП, МПДП). Методы АМ1 (Аустинская модель-1), РМЗ и т.д.
3. Тема Альтернантные углеводороды. Хюккелевские и мебиусовские (антихюккелевские) системы. Бораны и карбораны. Клозо-, нидо- и арахно-соединения. Дельтаэдраны. Полиэдрические боргидридные анионы $VnHn$ 2- ($n = 5 \div 12$) и карбораны на их основе.

Список учебно-методических материалов:

1. Колчина Г.Ю. Квантовая химия: учеб. пособие для студ., обучающихся по направлениям подготовки "04.03.01-Химия" (профиль "Высокомолекулярные соединения"), "18.03.01-Химическая технология", профиль "технология и переработка полимеров"/ Г.Ю. Колчина; МОиН РФ; СФ БашГУ; Под ред. Н.Р. Файзуллиной, Т.П. Мудрик и др.. - Стерлитамак: Изд-во СФ БашГУ, 2016. - 44 с. - 30 экз.
2. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия : молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для студ. вузов / В. Г. Цирельсон. - М. : БИНОМ, 2010. - 496с. - 14 экз.
3. Крашенинин В.И., Газенаур Е.Г., Кузьмина Л.В. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам: учебное пособие // Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. - 56 стр.; [Электронный ресурс]. - URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&book_id=232678 (21.06.2021).
4. Магазинников А.Л., Мухачёв В.А. Введение в квантовую механику: учебное пособие // Томск: Эль Контент, 2010. - 112 стр.; [Электронный ресурс]. - URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&book_id=208685 (21.06.2021).
5. Ефремов Ю.С. Квантовая механика: учебное пособие // Москва, Берлин: Директ-Медиа, 2015. - 457 стр.; [Электронный ресурс]. - URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&book_id=273446 (21.06.2021).
6. Карлов Н.В., Кириченко Н.А. Начальные главы квантовой механики // Москва: Физматлит, 2006. - 360 стр.; [Электронный ресурс]. - URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&book_id=68397 (21.06.2021).

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

6.1. Перечень учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная учебная литература:

1. Колчина Г.Ю. Квантовая химия: учеб. пособие для студ., обучающихся по направлениям подготовки "04.03.01-Химия" (профиль "Высокомолекулярные соединения"), "18.03.01-Химическая технология", профиль "технология и переработка полимеров"/ Г.Ю. Колчина; МОиН РФ; СФ БашГУ; Под ред. Н.Р. Файзуллиной, Т.П. Мудрик и др.. - Стерлитамак: Изд-во СФ БашГУ, 2016. - 44 с. - 30 экз.
2. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для студ. вузов / В. Г. Цирельсон. - М. : БИНОМ, 2010. - 496с. - 14 экз.

Дополнительная учебная литература:

1. Карлов Н.В., Кириченко Н.А. Начальные главы квантовой механики // Москва: Физматлит, 2006. - 360 стр.; [Электронный ресурс]. - URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&book_id=68397 (16.06.2021).
2. Крашенинин В.И., Газенаур Е.Г., Кузьмина Л.В. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам: учебное пособие // Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. - 56 стр.; [Электронный ресурс]. - URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&book_id=232678 (16.06.2021).
3. Магазинников А.Л., Мухачёв В.А. Введение в квантовую механику: учебное пособие // Томск: Эль Контент, 2010. - 112 стр.; [Электронный ресурс]. - URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&book_id=208685 (16.06.2021).
4. Ефремов Ю.С. Квантовая механика: учебное пособие // Москва, Берлин: Директ-Медиа, 2015. - 457 стр.; [Электронный ресурс]. - URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&book_id=273446 (16.06.2021).

6.2. Перечень электронных библиотечных систем, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

№ п/п	Наименование документа с указанием реквизитов
--------------	--