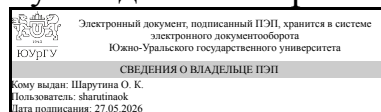


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель направления



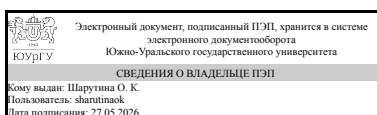
О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.О.23 Введение в квантовую химию
для направления 04.03.01 Химия
уровень Бакалавриат
форма обучения очная
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

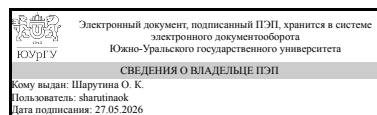
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 17.07.2017 № 671

Зав.кафедрой разработчика,
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,
д.хим.н., проф., заведующий
кафедрой



О. К. Шарутина

1. Цели и задачи дисциплины

Целью курса является подготовка высококвалифицированного специалиста-химика, способного глубоко понимать теорию строения атомов и молекул, природу химической связи и реакционной способности химических соединений. Задачи: познакомить студентов с основными понятиями, методами и законами квантовой механики, продемонстрировать возможность их применения в решении проблем современной химии, сформировать у студентов представления о современных квантово-химических расчетах.

Краткое содержание дисциплины

Основные постулаты и математический аппарат квантовой механики; приближенные методы решения квантово-механических задач; основные положения квантовой химии; неэмпирические и полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Знает: общие принципы и методы квантовой химии Умеет: применять теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
1.О.10 Теория вероятностей и математическая статистика, 1.О.12 Цифровые технологии, ФД.04 Информационные технологии и искусственный интеллект	1.О.24 Строение вещества, Производственная практика (преддипломная) (8 семестр)

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
1.О.12 Цифровые технологии	Знает: - аппаратное и программное обеспечение цифровых технологий, базовые принципы и основы алгоритмизации, парадигмы, современные и основные языки программирования, систем управления базами данных, low и no-code разработки; - современные информационные ресурсы и информационные технологии, средства поиска, хранения, передачи, систематизации и обработки

информации;- отраслевые цифровые технологии и цифровые сервисы, особенности их применении для повышения эффективности, конкурентоспособности и устойчивости работы отраслевых организаций;- основы работы с офисными и/или прикладными отраслевыми программами, их основные модули и функции., - современные цифровые технологии, сквозные цифровые технологии, возможности их применения для решения исследовательских и практических задач профессиональной деятельности; - принципы разработки и особенности использования цифровых технологий в отраслях с учетом требований информационной безопасности; - современные программные средства и информационно-коммуникационные технологии, используемые для решения профессиональных задач с учетом отраслевых особенностей; Умеет: - использовать отраслевые цифровые технологии, сервисы и программы для решения задач профессиональной деятельности с учетом требований информационной безопасности;- использовать современные средства поиска, передачи, хранения, систематизации, обработки и передачи информации.- разрабатывать алгоритмические структуры, работать с реляционными базами данных и WEB-конструкторами, low-code (LCDP) и no-code (NCDP) платформами; - использовать офисные программы, включая текстовые и табличные редакторы, средства для создания презентаций, организовывать совместную работу над документами с учетом требований информационной безопасности; использовать современные цифровые технологии и программные продукты для решения исследовательских и практических задач профессиональной деятельности с учетом требований информационной безопасности; Имеет практический опыт: - разработки типовых алгоритмов и применения языков программирования для решения профессиональных задач;- работы с реляционными базами данных, СУБД, WEB-конструкторами, LOW-code и no-code платформами;-использования информационных ресурсов, современных отраслевых цифровых сервисов и технологий для решении задач профессиональной деятельности; - работы с офисными программами, включая текстовые и табличные редакторы, средства для создания презентаций, организации совместной работы над документами., использования современных цифровых технологий и программных средств для решения исследовательских и практических

	задач профессиональной деятельности.
ФД.04 Информационные технологии и искусственный интеллект	Знает: базовые методы машинного обучения в задачах анализа данных и особенности их применения, а также способы осуществления сбора и подготовки данных для систем искусственного интеллекта, способы обработки данных в электронных таблицах и в специализированных программных средствах, соответствующих направлению подготовки Умеет: классифицировать и идентифицировать задачи искусственного интеллекта; строить прогнозы на основе базовых методов машинного обучения для решения профессиональных задач, применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных Имеет практический опыт: использования современных информационных технологий и специализированного программного обеспечения для обработки и представления информации в задачах профессиональной деятельности
1.О.10 Теория вероятностей и математическая статистика	Знает: расчетно-теоретические математические методы определения предполагаемого закона распределения генеральной совокупности по выборке, проверки выдвинутой гипотезы, оценки параметров распределения, методы обработки числовых данных с использованием современной вычислительной техники, определения и свойства основных понятий математической статистики Умеет: производить необходимые вычисления, в том числе с использованием современной вычислительной техники, для обработки результатов экспериментального исследования Имеет практический опыт: обработки выборки из массива эмпирических числовых данных и анализа полученных результатов с применением расчетно-теоретических математических методов, вычисления теоретических вероятностей случайных событий, составления законов распределения случайных величин, нахождения числовых характеристик, обработки выборок из массивов числовых данных, связанных с химическими или другими процессами

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 ч., 72,25 ч.
контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		6

Общая трудоёмкость дисциплины	144	144
Аудиторные занятия:	64	64
Лекции (Л)	32	32
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	32	32
Лабораторные работы (ЛР)	0	0
Самостоятельная работа (СРС)	71,75	71,75
Решение задач. Подготовка к контрольным работам.	30	30
Подготовка к зачету.	12	12
Изучение теоретического материала. Подготовка к письменным опросам.	29,75	29.75
Консультации и промежуточная аттестация	8,25	8,25
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	зачет

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Начала квантовой теории. Постулаты квантовой механики.	14	6	8	0
2	Одноэлектронные и многоэлектронные атомы.	20	8	12	0
3	Химическая связь.	12	8	4	0
4	Расчетные методы квантовой химии.	18	10	8	0

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	1	Введение. Начала квантовой теории. Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Экспериментальные доказательства корпускулярных свойств излучения. Использование идей квантования энергии. Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц. Уравнение де Бройля, принцип дополнительности, принцип неопределенности.	2
2	1	Уравнение Шредингера. Волновая функция и ее свойства. Постулаты квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики. Операторы и их свойства. Операторы физических величин.	2
3	1	Частные случаи решения уравнения Шредингера. Движение частицы в потенциальном ящике (одномерная и трехмерная задачи). Одномерный жесткий ротатор. Понятие о квантовых числах.	2
4	2	Уравнение Шредингера для атома водорода. Волновая функция. Система квантовых чисел. Атомная орбиталь. Графическое изображение радиальной и угловой частей волновой функции.	2
5	2	Атом водорода. Расчет средних величин. Среднее и наиболее вероятное расстояния электрон-ядро. Средние значения потенциальной, кинетической и полной энергий. Теорема вириала. Спектры водородоподобных атомов. Правила отбора.	2
6	2	Многоэлектронные атомы. Гамильтониан многоэлектронного атома. Одноэлектронное приближение. Вариационный метод. Волновые функции Хартри. Метод самосогласованного поля.	2
7	2	Принцип Паули. Определители Слэтера. Метод Хартри-Фока. Атомные	2

		орбитали Слэтера. Эффективное главное квантовое число и заряд. Константа экранирования. Потенциал ионизации. Сродство к электрону. Квантовые числа многоэлектронных атомов. Термы. Спектры Многоэлектронных атомов.	
8	3	Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод валентных связей. Расчет молекулы водорода. Уточнение расчетов.	2
9	3	Метод молекулярных орбиталей. Идея метода. Общие положения. Приближение ЛКАО. Уравнения Рутаана.	2
10	3	Учет электронной корреляции в орбитальных моделях. Выбор базисных атомных функций. Классификация МО. Электронные конфигурации молекул.	2
11	3	Силовой и энергетический аспекты описания химической связи. Теорема Гельмана-Фейнмана. Электростатическая теорема. Теорема вириала	2
12	4	Расчетные методы квантовой химии. Общая характеристика неэмпирических и полумпирических методов расчета.	2
13	4	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ). Основные положения. Аннулены. Энергетические диаграммы МО.	2
14	4	Расчет коэффициентов при атомных орбиталях в методе МОХ. Олефины. Полиены.	2
15	4	Расчет электронной плотности, заряда, порядка связи, индекса свободной валентности.	2
16	4	Применение метода Хюккеля при корреляции физических свойств сопряженных систем.	2

5.2. Практические занятия, семинары

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание практического занятия, семинара	Кол-во часов
1	1	Корпускулярно-волновые свойства излучения и микрочастиц. Решение задач.	2
2	1	Постулаты квантовой механики. Операторы и их свойства. Решение задач.	2
3	1	Частные случаи решения уравнения Шредингера. Расчет средних значений импульса, координаты частицы, кинетической энергии. Решение задач.	2
4	1	Начала квантовой теории. Контрольная работа	2
5	2	Водородоподобные атомы. Решение уравнения Шредингера. Волновая функция. Расчет средних значений потенциальной, кинетической и полной энергий. Средняя скорость движения электрона. Решение задач.	2
6	2	Водородоподобные атомы. Расчет средних величин. Среднее расстояние электрон-ядро. Решение задач.	2
7	2	Многоэлектронные атомы. Приближенные методы решения уравнения Шредингера. Способы представления волновой функции	2
8	2	Многоэлектронные атомы. Атомные орбитали Слэтера. Потенциал ионизации и сродство к электрону. Решение задач.	2
9	2	Спин-орбитальное взаимодействие. Квантовые числа и термы многоэлектронных атомов. Решение задач.	2
10	2	Одноэлектронные и многоэлектронные атомы. Контрольная работа	2
11	3	Квантово-химическое описание химической связи. Метод валентных связей	2
12	3	Квантово-химическое описание химической связи. Метод молекулярных орбиталей	2
13	4	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Аннулены. Расчет энергии молекулярных орбиталей. Оценка устойчивости систем. Энергетические диаграммы.	2
14	4	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Полиены. Расчет энергии	2

		молекулярных орбиталей. Энергетические диаграммы. Расчет коэффициентов при атомных орбиталях.	
15	4	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Расчет электронной плотности, заряда, порядка связи, индекса свободной валентности.	2
16	4	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Контрольная работа	2

5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС			
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Семестр	Кол-во часов
Решение задач. Подготовка к контрольным работам.	Шарутина, О.К. Введение в квантовую химию: задачи и упражнения / О.К. Шарутина. – Челябинск: Изд. Центр ЮУрГУ, 2015. – 194 с. http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000540017 Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] учеб. пособие для вузов по хим. специальностям В. И. Барановский. - М.: Академия, 2008. - 382, [1] с. ил.	6	30
Подготовка к зачету.	Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела Текст учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с., [12] л. цв. ил. ил., табл. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] учеб. пособие для вузов по хим. специальностям В. И. Барановский. - М.: Академия, 2008. - 382, [1] с. ил.	6	12
Изучение теоретического материала. Подготовка к письменным опросам.	Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела Текст учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с., [12] л. цв. ил. ил., табл. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] учеб. пособие для вузов по хим. специальностям В. И. Барановский. - М.: Академия, 2008. - 382, [1] с. ил.	6	29,75

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	6	Текущий контроль	Письменный опос 1	0,1	6	Письменный опрос проводится на занятиях после изучения определенной темы для	зачет

						контроля усвоения теоретического материала. Процедура занимает 10 минут. Опрос по Разделу 1 состоит из 3 частей, каждая из которых включает 2 вопроса. Ответы оцениваются следующим образом: 1 балл – полный и логичный ответ; 0,5 балла – ответ краткий, не позволяет оценить полноту понимания сущности вопроса; 0 баллов – ответа нет.	
2	6	Текущий контроль	Контрольная работа №1	0,2	10	Контрольная работа №1 включает материал Раздела 1. Вариант контрольной работы содержит 5 задач. Правильная решенная задача с подробным решением – 2 балла; 1,5 балла – задача решена, но имеются не принципиальные ошибки или недочеты; 1 балл – ход решения задачи верный, но не доведено до конца; 0,5 балла – приведены расчетные формулы, но решения нет; 0 баллов – решение отсутствует.	зачет
3	6	Текущий контроль	Письменный опрос 2	0,1	8	Письменный опрос проводится на занятиях после изучения определенной темы для контроля усвоения теоретического материала. Процедура занимает 10 минут. Опрос по Разделу 2 состоит из 4 частей, каждая из которых включает 2 вопроса. Ответы оцениваются следующим образом: 1 балл – полный и логичный ответ; 0,5 балла – ответ краткий, не позволяет оценить полноту понимания сущности вопроса; 0 баллов – ответа нет.	зачет
4	6	Текущий контроль	Контрольная работа №2	0,2	12	Контрольная работа №2 включает материал Раздела 2. Вариант контрольной работы содержит 6 задач. Правильная решенная задача с подробным решением – 2 балла; 1,5 балла – задача решена, но имеются не принципиальные ошибки или недочеты; 1 балл – ход решения задачи верный, но не доведено до конца; 0,5 балла – приведены расчетные формулы, но решения нет; 0 баллов – решение отсутствует.	зачет
5	6	Текущий контроль	Письменный опрос 3	0,1	8	Письменный опрос проводится на занятиях после изучения определенной темы для контроля усвоения теоретического материала. Процедура занимает 10 минут. Опрос по Разделу 3 состоит из 4 частей, каждая из которых включает 2 вопроса. Ответы оцениваются следующим образом: 1 балл – полный и логичный ответ; 0,5 балла – ответ краткий, не позволяет оценить полноту понимания сущности вопроса; 0 баллов – ответа нет.	зачет
6	6	Текущий контроль	Письменный опрос 4	0,1	4	Письменный опрос проводится на занятиях после изучения определенной темы для контроля усвоения теоретического материала. Процедура занимает 10 минут.	зачет

						Опрос по Разделу 4 состоит из 2 частей, каждая из которых включает 2 вопроса. Ответы оцениваются следующим образом: 1 балл – полный и логичный ответ; 0,5 балла – ответ краткий, не позволяет оценить полноту понимания сущности вопроса; 0 баллов – ответа нет.	
7	6	Текущий контроль	Контрольная работа №3	0,2	10	Контрольная работа №3 содержит 2 задачи, максимальный балл за каждую из которых составляет 5 баллов. 5 баллов – задача решена полностью, выполнены все пункты. 4 балла – задача в целом решена, но не выполнен один из пунктов (например, отсутствуют диаграммы волновых функций – молекулярных орбиталей). 3 балла – в ответах содержатся ошибки, свидетельствующие о неумении анализировать результаты. 2 балла – в ответах содержатся ошибки, свидетельствующие о непонимании теоретических основ. 1 балл – задача решена не более, чем на 50%, в ответах содержатся ошибки. 0 баллов – задача не решена.	зачет
8	6	Промежуточная аттестация	Зачет	-	4	Зачет проводится в форме собеседования по билетам, в каждый из которых входит 2 вопроса. Каждый вопрос оценивается в 2 балла - полный ответ, свободное владение излагаемым материалом; 1 балл - в ответе допущены ошибки, ответ не полный; 0 баллов - ответ содержит грубые ошибки, свидетельствующие о непонимании материала, или нет ответа.	зачет

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
зачет	На зачете происходит оценивание учебной деятельности обучающихся по дисциплине на основе полученных оценок за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля, при условии выполнения всех контрольных мероприятий. Обучающийся может повысить свой рейтинг, пройдя процедуру собеседования, которая не является обязательной. В ходе собеседования обучающемуся могут быть заданы уточняющие или дополнительные вопросы.	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ							
		1	2	3	4	5	6	7	8
ОПК-3	Знает: общие принципы и методы квантовой химии	+	+	+	+	+	+	+	+
ОПК-3	Умеет: применять теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности		+	+	+	+	+	+	+

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела Текст учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с., [12] л. цв. ил. ил., табл.

б) дополнительная литература:

1. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] учеб. пособие для вузов по хим. специальностям В. И. Барановский. - М.: Академия, 2008. - 382, [1] с. ил.

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

Не предусмотрены

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Шарутина, О.К. Введение в квантовую химию: задачи и упражнения /О.К. Шарутина. - Челябинск: Изд. центр ЮУрГУ, 2015. - 194 с.

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Шарутина, О.К. Введение в квантовую химию: задачи и упражнения /О.К. Шарутина. - Челябинск: Изд. центр ЮУрГУ, 2015. - 194 с.

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Электронный каталог ЮУрГУ	Шарутина, О.К. Введение в квантовую химию: задачи и упражнения / О.К. Шарутина. – Челябинск: Изд. Центр ЮУрГУ, 2015. – 194 с. http://www.lib.susu.ac.ru/fld?base=SUSU_METHOD&key=000540017
2	Основная литература	ЭБС издательства Лань	Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие для вузов / В. И. Барановский. — 5-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2025. — 428 с. — ISBN 978-5-507-51139-6. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/505847 (дата обращения: 27.05.2026). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
3	Дополнительная литература	ЭБС издательства Лань	Крашенинин, В. И. Квантовая химия : учебное пособие / В. И. Крашенинин, Л. В. Кузьмина, Е. Г. Газенаур. — Кемерово : КемГУ, 2019. — 82 с. — ISBN 978-5-8353-2440-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/135217 (дата обращения: 27.05.2026). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

4	Дополнительная литература	ЭБС издательства Лань	Назмитдинов, Р. Г. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / Р. Г. Назмитдинов, С. А. Новикова. — Дубна : Государственный университет «Дубна», 2021. — 123 с. — ISBN 978-5-89847-631-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/196986 (дата обращения: 27.05.2026). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
---	---------------------------	-----------------------------	---

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Windows(бессрочно)
2. Microsoft-Office(бессрочно)
3. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)"-Портал "Электронный ЮУрГУ" (<https://edu.susu.ru>)(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

Нет

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Лекции	202 (1а)	Компьютер, проектор с экраном, сеть Интернет, пакет Microsoft Office
Практические занятия и семинары	307 (1а)	Основное оборудование
Зачет	307 (1а)	Основное оборудование
Самостоятельная работа студента	208 (1а)	Компьютер, сеть Интернет, пакет Microsoft Office
Контроль самостоятельной работы	307 (1а)	Основное оборудование