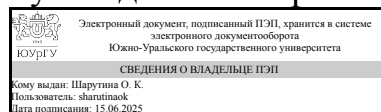


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель направления



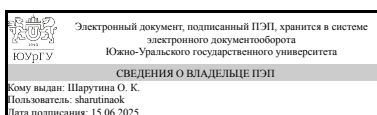
О. К. Шарутина

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

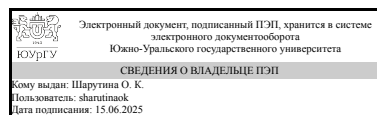
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 17.07.2017 № 671

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.12 Цифровые технологии, ФД.04 Информационные технологии и искусственный интеллект, 1.О.10 Теория вероятностей и математическая статистика	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: основные понятия информатики; формы и способы представления данных в ЭВМ; состав, назначение функциональных компонентов и программного обеспечения ЭВМ; классификацию современных компьютерных систем; специализированные программные средства, соответствующие направлению подготовки; офисные приложения Имеет практический опыт: обеспечения безопасности

	информации с помощью типовых программных средств (антивирусов, архиваторов, стандартных сетевых средств обмена информацией), способы обработки данных в электронных таблицах и в специализированных программных средствах, соответствующих направлению подготовки Умеет: применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных Умеет: применять типовые программные средства оформления текстовой и программной документации, применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных Имеет практический опыт: обеспечения безопасности информации с помощью типовых программных средств (антивирусов, архиваторов, стандартных сетевых средств обмена информацией)
ФД.04 Информационные технологии и искусственный интеллект	Знает: способы обработки данных в электронных таблицах и в специализированных программных средствах, соответствующих направлению подготовки, базовые методы машинного обучения в задачах анализа данных и особенности их применения, а также способы осуществления сбора и подготовки данных для систем искусственного интеллекта Умеет: применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных, классифицировать и идентифицировать задачи искусственного интеллекта; строить прогнозы на основе базовых методов машинного обучения для решения профессиональных задач 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: определения и свойства основных понятий математической статистики, 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 Умеет: производить необходимые вычисления, в том числе с использованием современной вычислительной техники, для обработки результатов экспериментального исследования Имеет практический опыт: 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, обработки выборки из массива

	эмпирических числовых данных и анализа полученных результатов с применением расчетно-теоретических математических методов
--	---

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
<i>Аудиторные занятия:</i>	64	64
Лекции (Л)	32	32
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	32	32
Лабораторные работы (ЛР)	0	0
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	71,75	71,75
Решение задач. Подготовка к контрольным работам.	30	30
Изучение теоретического материала. Подготовка к письменным опросам.	29,75	29.75
Подготовка к зачету.	12	12
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	2

		квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики. Операторы и их свойства. Операторы физических величин.	
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 орбитали Слэтера. Эффективное главное квантовое число и заряд. Константа экранирования. Потенциал ионизации. Сродство к электрону. Квантовые числа многоэлектронных атомов. Термы. Спектры Многоэлектронных атомов.	2
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 полуэмпирических 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	2

		электрон-ядро. Решение задач.	
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 молекулярных орбиталей. Энергетические диаграммы. Расчет коэффициентов при атомных орбиталях.	2
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
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
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

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 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.	зачет
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	зачет

						баллов – решение отсутствует.	
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. 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.	зачет
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. 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
4	Методические пособия для	Электронный каталог	Шарутина, О.К. Введение в квантовую химию: задачи и упражнения / О.К. Шарутина. – Челябинск: Изд. Центр ЮУрГУ,

самостоятельной работы студента	ЮУрГУ	2015. – 194 с. http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000540017
---------------------------------	-------	---

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
Практические занятия и семинары	307 (1а)	Основное оборудование
Лекции	202 (1а)	Компьютер, проектор с экраном, сеть Интернет, пакет Microsoft Office
Контроль самостоятельной работы	307 (1а)	Основное оборудование
Самостоятельная работа студента	208 (1а)	Компьютер, сеть Интернет, пакет Microsoft Office
Зачет	307 (1а)	Основное оборудование