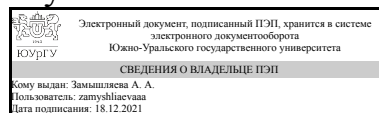


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Институт естественных и точных
наук



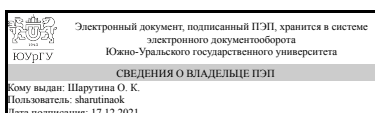
А. А. Замышляева

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

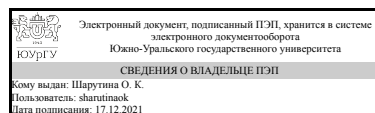
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 17.07.2017 № 671

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



О. К. Шарутина

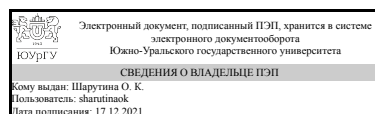
Разработчик программы,
д.хим.н., проф., заведующий
кафедрой



О. К. Шарутина

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления
д.хим.н., проф.



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.11 Информатика, 1.О.09 Теория вероятностей и математическая статистика	Производственная практика, преддипломная практика (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.09 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
1.О.11 Информатика	Знает: способы обработки данных в электронных таблицах и в специализированных программных средствах, соответствующих направлению подготовки, 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 Умеет: применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных, применять типовые программные средства оформления текстовой и программной документации Имеет практический опыт: обеспечения безопасности информации с помощью типовых программных средств (антивирусов, архиваторов, стандартных сетевых средств обмена информацией)

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
с применением дистанционных образовательных технологий	0	
Изучение теоретического материала. Подготовка к	29,75	29.75

письменным опросам.		
Подготовка к зачету.	12	12
Решение задач. Подготовка к контрольным работам.	30	30
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 орбитали Слэтера. Эффективное главное квантовое число и заряд. Константа экранирования. Потенциал ионизации. Средство 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 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 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
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
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

6. Текущий контроль успеваемости, промежуточная аттестация

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	Контрольная	0,2	5	Контрольная работа №1 включает материал	зачет

		контроль	работа №1			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.	
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	6	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. 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	зачет

						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.	
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. Оценочные материалы

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								

Фонды оценочных средств по каждому контрольному 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	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 522 с. — ISBN 978-5-93208-518-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/172254 (дата обращения: 25.10.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Демидович, Б. П. Математические основы квантовой механики : учебное пособие / Б. П. Демидович. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 200 с. — ISBN 5-8114-0624-X. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/167716 (дата обращения: 25.10.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
3	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул : учебное пособие / И. Майер ; художник Н. В. Зотова. — 4-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 387 с. — ISBN 978-5-93208-516-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/166732 (дата обращения: 25.10.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
4	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/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000540017

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Windows(бессрочно)

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