

Компонент ОПОП 04.03.01 Химия
наименование ОПОП

Б1.О.27
шифр дисциплины

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

Дисциплины
(модуля)

Квантовая химия

Разработчик :

Воронько Н.Г.
ФИО

доцент кафедры химии
должность

доктор хим. наук, доцент
ученая степень,
звание

Утверждено на заседании кафедры

химии

наименование кафедры

протокол № 6 от 06.02.2024

Заведующий кафедрой химии

подпись

Дякина Т.А.
ФИО

Мурманск
2024

Пояснительная записка

Объем дисциплины 4 з.е.

- 1. Результаты обучения по дисциплине**, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций, установленными образовательной программой

Компетенции	Индикаторы достижения компетенций	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	ИД-1опк.3 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности. ИД-2опк.3 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.	Знать: физико-химические основы, необходимые для решения профессиональных задач в области квантовой химии вещества; понятийный аппарат квантовой химии и его связь с системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии.
ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	ИД-1опк.4 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности. ИД-2опк.4 Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик. ИД-3опк.4 Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.	Уметь: использовать физико-химические для решения типовых профессиональных задач по основным разделам квантовой химии; решать модельные задачи квантовой химии и анализировать их решения в терминах атомно-молекулярной структуры вещества.
ОПК-5. Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	ИД-1опк.5 Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля. ИД-2опк.5 Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности.	Владеть: навыками решения типовых задач по основным разделам квантовой химии; формами и методами научного познания при формулировании и решении профессиональных задач в области квантовой химии.

2. Содержание дисциплины

Тема 1. Введение в квантовую химию

«Генеалогия» квантовой механики. Частицы и волны. Основные экспериментальные предпосылки возникновения квантовой механики. Основные этапы развития квантовой теории. Линейчатый спектр водорода (Бальмер). Идея квантования энергии (Планк). Фотоэффект (Эйнштейн). Атомная теория Бора. Корпускулярно-волновой дуализм де Бройля. Принцип неопределённости Гейзенберга. Предмет квантовой химии. Главные тенденции в развитии квантовой химии.

Тема 2. Основные положения и методы квантовой химии

Операторы. Наблюдаемые. Среднее значение и дисперсия. Плотность вероятности. Соотношение неопределённостей. Представление наблюдаемых физических величин: операторы координаты, импульса, момента импульса, кинетической и потенциальной энергии, гамильтониан. Волновая функция. Волновое уравнение Шрёдингера для атомов и молекул как композитов ядер и электронов. Стационарное уравнение Шрёдингера. Радиальное уравнение Шрёдингера. Примеры решения уравнения Шрёдингера: прямоугольная потенциальная яма, гармонический осциллятор. Постулат о средней величине. Принцип запрета Паули. Постулат о самосопряжённом операторе. Принцип суперпозиции состояний.

Тема 3. Многоэлектронные атомы

Приближение независимых электронов. Определители Слэтера. Энергия определителя Слэтера. Полные орбитальные и спиновые квантовые числа. Метод самосогласованного поля. Метод Хартли–Фока. Канонические и неканонические орбитали. Сродство к электрону и потенциал ионизации. Орбитальные энергии и полная энергия. Теорема Купманса.

Тема 4. Теория момента импульса

Переход к сферической системе координат. Присоединённые полиномы Лежандра. Собственные функции оператора L_z . Коммутационные соотношения для компонент момента импульса. Правила сложения. Атом водорода.

Тема 5. Электрон в кулоновском поле: атом водорода

Разделение переменных. Радиальные и угловые функции. Орбитали. Водородоподобные атомы. Понятие об одноэлектронных состояниях. Вырождение одноэлектронных состояний.

Тема 6. Молекулярные системы

Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Представление молекулярных орбиталей (МО) как линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Разрыхляющие и связывающие молекулярные орбитали. Метод Рутана ССП МО ЛКАО. Представление о неэмпирических и полумэмпирических методах. Классификация методов. Сходимость к самосогласованному полю. Процедура энергетического сдвига вакантных состояний.

Тема 7. Типы базисов атомных орбиталей

Приближённые аналитические функции атомных орбиталей Слэтера и Гаусса. Контрактированные базисные наборы. Базисные наборы Попла и базисные наборы Хузинаги–Даннинга. Базисные наборы атомных натуральных орбиталей. Анализ орбитальных заселённостей. Заселённости Малликена и Левдина. Локализованные

орбитали.

Тема 8. Теоретическое моделирование профиля реакций

Теория переходного состояния. Равновесные конфигурации молекул и седловые точки. Расчёт составляющих энергии Гиббса. Анализ поверхности потенциальной энергии. Методы оптимизации геометрии. Поиск по методу Ньютона–Рафсона. Расчёт и диагонализация гессиана. Оптимизация структуры переходных состояний. Путь реакции и координата реакции. Сканирование поверхности потенциальной энергии.

Тема 9. Зонная теория

Периодические граничные условия. Разложение волновых функций по плоским волнам. Зонная картина электронного строения. Функции Блоха. Функции Ванье. Проводники, изоляторы, полупроводники. Нарушения симметрии. Электронная структура вблизи поверхности. Особенности расчётов полубесконечных кристаллов.

3. Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины

- мультимедийные презентационные материалы по дисциплине «Квантовая химия» представлены в электронном курсе в ЭИОС МАУ;
- методические указания к выполнению практических работ представлены в электронном курсе в ЭИОС МАУ;
- методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины представлены на официальном сайте МАУ в разделе «Информация по образовательным программам, в том числе адаптированным».

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

Фонд оценочных средств (ФОС) является отдельным компонентом образовательной программы, разработан в форме отдельного документа, представлен на официальном сайте МАУ в разделе «Информация по образовательным программам, в том числе адаптированным». ФОС включает в себя:

- перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения дисциплины;
- задания текущего контроля;
- задания промежуточной аттестации;
- задания внутренней оценки качества образования.

5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы (печатные издания, электронные учебные издания и (или) ресурсы электронно-библиотечных систем)

Основная литература

1. **Киселёва, Е. В.** Сборник примеров и задач по физической химии / Е. В. Киселёва, Г. С. Каретников, И. В. Кудряшов. – М. : Высшая школа, 1983. – 456 с. (Библиотека МГТУ – 102 экз.)
2. **Путинцев, Н. М.** Сборник расчётно-графических заданий по физической химии / Н. М. Путинцев, Н. Г. Воронько. – Мурманск : Изд-во МГТУ, 2006. – 170 с. (Библиотека МАУ – 194 экз.)
3. **Степанов, Н. Ф.** Квантовая механика молекул и квантовая химия / Н. Ф. Степанов, В. И. Пупышев. – М. : Изд-во МГУ, 1991. – 384 с.
4. **Стромберг, А. Г.** Физическая химия : учеб. для хим. спец. вузов / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко ; под ред. А. Г. Стромберга. – 4-е изд., испр. – М. : Высшая школа,

2001. – 527 с. (Библиотека МАУ – 20 экз.)

5. Физическая химия : учебник для вузов. В 2 кн. Кн. 1. Строение вещества. Термодинамика / **К. С. Краснов**, Н. К. Воробьев, И. Н. Годнев [и др.] ; под ред. К. С. Краснова. - 3-е изд., испр. - Москва : Высш. шк., 2001. - 512 с. (Библиотека МАУ – 29 экз.)

Дополнительная литература

1. Краткий справочник физико-химических величин / под ред. **А. А. Равделя**, А. М. Пономарёвой. – 10-е изд., испр. и доп. – СПб. : «Иван Фёдоров», 2002. – 240 с. (Библиотека МАУ – 29 экз.)
2. **Эткинс, П.** Физическая химия. В 2 т. Т. 1 / П. Эткинс ; пер. с англ. К. П. Бутина. – М. : Мир, 1980. – 582 с. (Библиотека МГТУ – 1 экз.)
3. **Эткинс, П.** Физическая химия. В 2 т. Т. 2 / П. Эткинс ; пер. с англ. К. П. Бутина. – М. : Мир, 1980. – 584 с. (Библиотека МГТУ – 1 экз.)

6. Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1) Государственная система правовой информации - официальный интернет-портал правовой информации- URL: <http://pravo.gov.ru>

2) Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам»_- URL: <http://window.edu.ru>

3) Справочно-правовая система. Консультант Плюс - URL: <http://www.consultant.ru/>

4) Электронно-библиотечная система «Издательства «ЛАНЬ» <http://e.lanbook>

5) Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» <http://bibli>

6) Электронно-библиотечная система «Консультант студента» <http://www.studentlibrary.ru/>

Материалы, находящиеся в свободном доступе на следующих сайтах:

<http://chemexpress.fatal.ru>

<http://www.xumuk.ru>

<http://wikipedia.ru>

<http://www.chemport.ru>

<http://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>

7. Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства

- 1) Офисный пакет Microsoft Office 2007
- 2) Система оптического распознавания текста ABBYY FineReader
- 3) Офисный пакет Microsoft Office 2010 Russian Academic OPEN, лицензия № 47233444 от 30.07.2010 (договор 32/285 от 27.07.2010 г.)
- 4) Антивирус Dr.Web Desktop Security Suite (комплексная защита), антивирус Dr.Web Server Security Suite (серверный) (договор №7689 от 23.07.2018, договор №7236 от 03.11.2017, договор №810-000046 от 26.06.2017)

8. Обеспечение освоения дисциплины лиц с инвалидностью и ОВЗ

Обучающиеся из числа инвалидов и лиц с ОВЗ обеспечиваются печатными и (или) электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины представлено в приложении к ОПОП «Материально-технические условия реализации образовательной программы» и включает:

– учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных программой бакалавриата, оснащенные оборудованием и техническими средствами обучения;

– помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа к электронной информационно-образовательной среде МАУ.

Не допускается замена оборудования его виртуальными аналогами.

10. Распределение трудоемкости по видам учебной деятельности

Таблица 1 - Распределение трудоемкости

Вид учебной нагрузки **	Распределение трудоемкости дисциплины по формам обучения											
	Очная				Очно-заочная				Заочная			
	Семестр			Всего часов	Семестр			Всего часов	Семестр/Курс			Всего часов
	5											
Лекции	40		-	40								
Практические работы	40		-	40								
Лабораторные работы	-		-									
Контактная работа для выполнения курсовой работы (проекта)			-									
Самостоятельная работа	64		-	64								
Выполнение курсовой работы (проекта)	-		-	-								
Подготовка к промежуточной аттестации (контроль)	-		-	-								
Всего часов по дисциплине	144			144								

Формы промежуточной аттестации и текущего контроля

Экзамен	-											
Зачет/зачет с оценкой	+/-											
Курсовая работа (проект)	-											
Количество расчетно-графических работ	-											
Количество контрольных работ	-											

Количество рефератов	-											
Количество эссе	-											

Перечень практических работ

№ п/п	Темы практических работ
Очная форма	
1.	Свойства волновой функции
2.	Уравнение Шрёдингера для стационарных состояний
3.	Принцип суперпозиции квантовых состояний
4.	Векторы и матрицы: основные понятия и определения
5.	Частица в потенциальной яме с непроницаемыми стенками
6.	Уравнение Шрёдингера в сферических координатах
7.	Расчёт средних величин. Многоэлектронные атомы
8.	Принцип Паули. Определители Слэтера
9.	Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул
10.	Диагонализация матриц
11.	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля
12.	Учёт конфигурационного взаимодействия
13.	Ортонормированный базис для квантовохимических расчётов
14.	Классы точечных групп симметрии