

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Кафедра химии



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

Батыгов З.О.

2018 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
КВАНТОВАЯ ХИМИЯ**

Факультет: химико-биологический

Направление подготовки /специальность: 04.03.01. Химия

Программа: академический бакалавриат

Квалификация (степень) выпускника: бакалавр

Форма обучения: очная

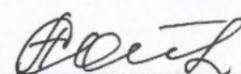
МАГАС 20 18 г.

Составители рабочей программы

профессор. к.т.н.  / Арчакова Р.Д. /

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры химии

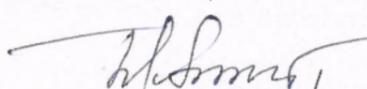
Протокол заседания № 6 от «24» апреля 2018г.

/ Заведующий кафедрой  / Султыгова З.Х. /

Рабочая программа одобрена учебно-методическим советом
химико-биологического факультета

Протокол заседания № 4 от «20» апреля 2018г.

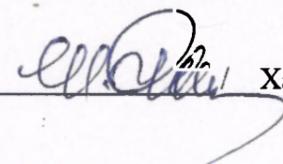
Председатель учебно-методического совета

 / Плиева А.М. /

Программа рассмотрена на заседании Учебно-методического совета университета

протокол № 5 от «23» мая 2018 г.

Председатель Учебно-методического совета университета

 / Хашагульгов Ш.Б. /

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Квантовая химия» являются:

- 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.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Квантовая химия» относится к вариативной части обязательных дисциплин; изучается в 4 семестре и представляет собой теоретическую основу для изучения последующих курсов химического профиля – физической химии, коллоидной химии, химической технологии, физико-химических методов исследования.

Таблица 2.1.

Связь дисциплины «Квантовая химия» с предшествующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, предшествующие дисциплине «Квантовая химия»	Семестр
Б1.Б.5	Математика	1-4
Б1.Б.6	Физика	1-4
Б1.Б.7	Информатика	1-4
Б1.Б.8	Неорганическая химия	2,3

Таблица 2.2.

Связь дисциплины «Квантовая химия» с последующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, следующие за дисциплиной «Квантовая химия»	Семестр
Б1.В.ОД.3	Строение вещества	5
Б1.Б.10	Органическая химия	6,7
Б1.Б.11	Физическая химия	6,7
Б1.В.ОД.6	Физические методы исследования	6
Б1.В.ДВ.6	Теоретические основы неорганической химии	8
Б1.В.ДВ.10	Химическая технология	5

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

• **Знать:**

- роль квантовой химии как теоретического фундамента современной химии;
- о квантовой химии как разделе физической химии и ее роли в современной химии;
- возможности применения основ квантовой механики к решению химических задач;
- о границах применимости законов и теорий квантовой механики и квантовой химии;
- принципы использования теоретических и расчетных методов квантовой химии для решения различных практических задач.

• **Уметь:**

- продемонстрировать связь фундаментальных экспериментов с теорией квантовой механики с помощью известных математических методов; решать задачи по данной дисциплине.
- самостоятельно формулировать задачу физико-химического исследования в химических системах;
- пользуясь полученными знаниями, уметь выбирать оптимальные пути и методы решения поставленных задач;
- проводить физико-химические исследования систем и процессов с использованием современных методов и приборов ФХМА;
- проводить физико-химические расчеты;
- пользоваться справочной литературой;
- графически отображать полученные зависимости;
- анализировать и обсуждать результаты физико-химических исследований;
- вести научную дискуссию.

• **Владеть:**

- основами расчетных методов квантовой химии.

- пространственным мышлением;
- основными понятиями химии;
- навыками поиска и обработки информации.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

а) профессиональных (ПК) – ПК-1, ПК-3, ПК-9, ПК-12

Таблица 3.1.

Матрица связи компетенций, формируемых на основе изучения дисциплины «Квантовая химия», с временными этапами освоения ее содержания

Коды компетенций (ФГОС)	Компетенция	Семестр изучения
ПК-1	Способность выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	4
ПК-3	Владение системой фундаментальных химических понятий	4
ПК-9	Владение навыками расчета основных технических показателей технологического процесса	4
ПК-12	Способность принимать решения в стандартных ситуациях, брать на себя ответственность за результат выполнения заданий	4

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Таблица 4.1.

Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	4 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	144	144
Аудиторные занятия	70	70
Лекции	34	34
Практические занятия	34	34
Контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2
Самостоятельная работа студентов (СРС)	47	47
Контроль	27	27

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ

Таблица 5.1.

Структура и содержание дисциплины

п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра				
				Лекции	Практ. занят.	Самостоятельная работа	Формы контроля
1.	Становление квантовой механики и ее основные положения.	4	1,2	2	2	7	Тестир.
2	Квантово-механическое описание одноэлектронных атомов.	4	3-5	8	8	10	Опрос
3	Квантово-механическое описание многоэлектронных атомов.	4	6-10	8	8	10	Коллокви.
4	Квантовая теория обра-	4	11-	8	8	10	Опрос

	зования химической связи и химических реакций.		14				
5	Квантово-механическое описание различных молекулярных и кристаллических систем.	4	15-18	8	8	10	Опрос
	Итого:			34	34	47	

Таблица 5.2.

Конкретизация результатов освоения дисциплины

<i>ПК-1 Способность выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам</i>		
Знать: основы теории химического эксперимента при неорганическом синтезе; принципы органического синтеза и получения высокомолекулярных соединений; свойства химических соединений, правила их смешивания; методы качественного контроля химических процессов; методы количественного химического анализа; физические методы исследования; физико-химические методы анализа; методы разделения, концентрирования и очистки химических веществ.	Уметь: планировать химический эксперимент, прогнозировать результаты эксперимента, анализировать полученные экспериментальные данные, интерпретировать полученные экспериментальные результаты, оценивать эффективность экспериментальных методов, описывать свойства полученных химических соединений, выбирать метод исследования, методику проведения эксперимента в соответствии с поставленными задачами; выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам.	Владеть: техникой эксперимента; приемами выполнения эксперимента по заданной либо выбранной методике; навыками планирования синтеза органического вещества с заданными свойствами; техникой составления схемы анализа объекта; приемами измерения физических величин с заданной точностью; приемами измерения аналитического сигнала.
<i>ПК-3 Владение системой фундаментальных химических понятий</i>		
Знать: основы фундаментальных разделов химии: неорганической химии (состав, строение, свойства веществ и соединений), орга-	Уметь: применять теоретические знания для решения конкретных задач в химии; пользоваться современными	Владеть: основами теории фундаментальных разделов химии; навыками решения конкретных теоретических и экспериментальных

<p> нической химии (основные классы углеводородов, гомофункциональных, гетерофункциональных и гетероциклических соединений), аналитической химии (метрологические основы анализа, существо реакций, принципы и области использования химического анализа), физической химии (основы термодинамики, теории растворов и фазовых равновесий, химической кинетики и катализа, электрохимии); перспективы развития наук; роль химического анализа, основные особенности свойств высокомолекулярных систем (структура, свойства, методы синтеза, области применения полимеров), теоретические основы химико-технологических процессов; основные приближения квантовой химии; теоретические основы коллоидной химии, теорию строения кристаллов и схему их квалификации; возможные сферы их связи и приложения, возможность их использования в познавательной и профессиональной деятельности; перспективы развития биотехнологии. </p>	<p> представлениями основных разделов естественных наук для объяснения специфики поведения химических соединений; использовать данные по строению веществ и соединений для изучения их свойств; использовать структурные данные в исследовании. </p>	<p>задач.</p>
--	--	---------------

<i>ПК-9 Владение навыками расчета основных технических показателей технологического процесса</i>		
Знать: методику расчета основных технических показателей технологического процесса.	Уметь: производить расчеты основных технических показателей технологического процесса.	Владеть: навыками расчета основных технических показателей технологического процесса.
<i>ПК-12 Способность принимать решения в стандартных ситуациях</i>		
	Уметь: принимать решения в стандартных ситуациях, брать на себя ответственность за результат выполнения заданий.	

Содержание дисциплины «Квантовая химия»

Предмет квантовой механики. Основные этапы развития квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики. Операторы, их свойства. Эрмитовы операторы, их собственные значения и собственные функции. Вырождение.

Постулаты квантовой механики. Волновые функции, их свойства. Нормировка волновых функций. Вероятность результатов измерения физических величин, средние значения наблюдаемых. Плотность вероятности нахождения частиц в элементе объема пространства.

Принцип соответствия и операторы квантовой механики. Оператор Гамильтона. Соотношение неопределенностей Гейзенберга. Системы тождественных частиц. Фермионы и бозоны. Антисимметрия волновой функции для системы электронов. Принцип дополнительности Бора. Теорема Эренфеста.

Уравнение Шредингера. Точно решаемые задачи квантовой механики. Модельные задачи о прямоугольном ящике и гармоническом осцилляторе. Жесткий ротатор. Понятие о туннельном эффекте. Модель свободного электрона. Теорема Гильберта.

Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Атомные орбитали, их радиальные и угловые компоненты. Квантовые числа, их физический смысл. Теория момента импульса. Спин: операторы, собственные значения, собственные функции. Правила сложения моментов импульса. Спин-орбитальное взаимодействие.

Приближенные методы решения квантовомеханических задач. Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие вырождения энергетических уровней. Вариационная теорема

и линейный и нелинейный вариационные методы.

Многоэлектронный атом. Квантовые числа многоэлектронного атома. Термы многоэлектронного атома. Правила Хунда. L,S-связь. Правила и орбитали Слэтера-Зенера.

Переходы под влиянием электромагнитного излучения. Правила отбора, коэффициенты Эйнштейна. Влияние внешнего поля. Эффекты Штарка, Зеемана и Пашена-Бака.

Квантовая химия. Молекулярное уравнение Шредингера. Адиабатическое приближение. Приближение Борна-Оппенгеймера. Вращение системы ядер как целого и колебания ядер. Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменения при образовании химических соединений. Подход Бейдера.

Методы Хартри и Хартри-Фока. Самосогласованное поле (ССП). Уравнения метода ХФ. Представление МО в виде ЛКАО. Уравнения Хартри-Фока-Рутаана. Базисные функции Слэтера и Гаусса.

Классификация состояний и МО по симметрии. Расчеты двухатомных молекул. Корреляционные диаграммы двухатомных молекул. МО двухатомных гомо- и гетероядерных молекул. (He_2 , Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , CO , HF , LiF).

МО малых многоатомных молекул (BeH_2 , BH_3 , BF_3 , NH_3 , H_2O , CH_4 , C_2H_4 , NO_2).

Элементы и операции симметрии. Точечные группы. Таблицы характеров. Разложение приводимых представлений. Оператор проектирования.

Качественный подход к анализу геометрических конфигураций различных состояний молекул. Корреляционные диаграммы Уолша. Простой метод Хюккеля (МОХ) для π -электронных систем. σ - и π -МО. π -Электронное приближение. Расчеты простейших углеводородных и гетероатомных сопряженных систем методом МОХ.

Орбитали симметрии и эквивалентные орбитали. Гибридизация в базисе функций s-, p- и d-типов. Локализованные МО и классическая теория химического строения.

Квантовохимическое описание химических реакций. Переходное состояние на поверхности потенциальной энергии (ППЭ). индексы реакционной способности (ИРС). Теория граничных орбиталей Фукуи. Типы химических реакций. Согласованные (концертные) и ступенчатые процессы. Термические и фотохимические реакции.

Сохранение орбитальной симметрии (принцип Вудворда-Хоффмана). Примеры применения принципа и границы его применимости.

Основные направления развития квантовой химии. Методы компьютерной квантовой химии. Полуэмпирические и неэмпирические расчеты. Современные основные программные квантовохимические комплексы МОРАС, Gaussian, HyperChem.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе обучения используются традиционные образовательные технологии (лекции, семинары, практические работы) и активные инновационные образовательные технологии:

1. Семинар в диалоговом режиме применяется в основном при обсуждении выступлений студентов с докладами (рефератами)
2. Групповой разбор результатов контрольных работ
3. Встречи с сотрудниками и руководителями профильных лабораторий и предприятий - потенциальными работодателями выпускников.

В целом при изучении курса активные и интерактивные формы проведения занятий составляют не менее 30% аудиторных занятий.

7. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

Лекционные занятия проводятся 1 раз неделю в объеме 2 часов лекций и 2 часов практических занятий в 4 семестре. После окончания изучения каждой темы студенты проходят тестирование, собеседование, выполняют контрольные работы.

7.1. Перечень-учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

1. Блохинцев А.И. Основы квантовой механики. –М.: Наука, 1976.
2. Мелешина А. М. Курс квантовой механики для химиков.-М.: Высшая школа, 1980
3. Минкин В.И. , Миняев Р.М., Симкин Б. Я.. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. –М.: Химия, 1986.
4. Фларри Р. Квантовая химия. –М.: Мир, 1985.
5. Симкин Б.Я., Клецкий М. Е., Глуховцев М.Н. Задачи по квантовой теории

7.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 7.1.. Содержание самостоятельной работы обучающихся

Номер раздела (темы)	Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
1.	Основные этапы развития квантовой теории. Квантовая химия как основа современной химической науки.	4	собеседование, тестовый контроль
2.	Жесткий ротатор. Модель свободного электрона.	4	собеседование, тестовый контроль
3.	Решение уравнения Шредингера для точно решаемых задач.	4	собеседование, тестовый контроль
4.	Теория возмущений. Вариационная теорема.	4	собеседование, тестовый контроль
5.	Гелиоподобная задача. L-S связь. Определители Слетера.	4	собеседование, тестовый контроль
6.	Приближение Борна-Оппенгеймера. Подход Бейдера.	4	собеседование, тестовый контроль
7.	Уравнения метода ХФ. Базисные функции Слэтера и Гаусса. Метод МО ЛКАО	4	собеседование, тестовый контроль
8.	Корреляционные диаграммы двухатомных молекул. Активные формы кислорода.	4	собеседование, тестовый контроль
9.	МО малых многоатомных молекул (NH_3 , H_2O).	5	собеседование, тестовый контроль

10.	<p>Диаграмма Уолша для молекулы метана.</p> <p>Расчет молекулы бутадиена-1,3 по методу Хюккеля.</p>	5	<p>собеседование, тестовый контроль</p>
11.	<p>Основные направления развития квантовой химии. Методы компьютерной квантовой химии.</p>	5	<p>собеседование, тестовый контроль</p>

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Фонды оценочных средств и критерии оценки представлены отдельно, как приложение к рабочей программе.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1) Основная литература:

1. Блохинцев А.И. Основы квантовой механики. –М.: Наука, 1976.
2. Гиллеспи Р. Геометрия молекул. – М.: Мир, 1975.
3. Карапетьянц М.Х. Дракин С.Н. Строение вещества. -М.: Высшая школа, 1977.
4. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. –М.: Высшая школа, 1977.
5. Лер Р. , Марчанд А. Орбитальная симметрия в вопросах и ответах. –М.: Мир, 1976.
6. Мелешина А. М. Курс квантовой механики для химиков.-М.: Высшая школа, 1980.
7. Минкин В.И. , Миняев Р.М. Неклассические структуры органических соединений. – Ростов-на-Дону: РГУ, 1985.
8. Минкин В.И. , Миняев Р.М., Симкин Б. Я. Теория строения молекул. –М.: Высшая школа, 1979.
9. Минкин В.И. , Миняев Р.М., Симкин Б. Я.. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. –М.: Химия, 1986.
10. Фларри Р. Квантовая химия. –М.: Мир, 1985.
11. Симкин Б.Я., Клецкий М. Е., Глуховцев М.Н. Задачи по квантовой теории молекул. – Ростов-на-Дону: РГУ, 1992.
12. Хофман Р. Строение твердых тел и поверхностей: взгляд химика – теоретика. –М.: Мир, 1990.
13. Эткинс П. Кванты. Справочник концепций. –М.: Мир, 1997.

2) Дополнительная литература:

1. Абаренков И.В., Братцев В.Ф., Тулуб А.В. Начала квантовой химии. –М.: Высшая школа, 1989.
2. Блюменфельд Л.А., Кукушкин А.К. Курс квантовой химии и строения молекул. –М.: МГУ, 1980.
3. Введение в квантовую химию. –М.: Мир, 1982.

4. Давтян О.К. Квантовая химия. –М.: Высшая школа, 1962.
5. Дмитриев И.С. Молекулы без химических связей. –Л.: Химия, 1980.
6. Дяткина М.Е. Основы теории молекулярных орбиталей. –М.: Наука, 1975.
7. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. –М.: Мир, 1979.
8. Кларк Т. Компьютерная химия. –М.: Мир, 1990.
9. Теддер Дж., Нехватал Э. Орбитальная теория в контурных диаграммах. –М.: Мир, 1988.
10. Флайгер У. Строение и динамика молекул. –М.: Мир, 1982. Т. 1,2.
11. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. М.: Мир, 1983.
12. Футзина С. Метод молекулярных орбиталей. – М.: Мир, 1983.
13. Хигаси К., Баба Х., Рембаум А. Квантовая органическая химия. – М.: Мир, 1967.
14. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. – М.: Химия, 1987.

3) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Научная электронная база данных издательства Elsevier, <http://www.sciencedirect.com/>
2. Научная электронная база данных издательства ACS Publication, <http://pubs.acs.org/>
3. Научно-поисковая электронная база данных Reaxys, <https://www.reaxys.com7/>
4. Научная электронная база данных издательства Springer, <http://www.springerlink.com/>

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Требования к аудитории для лекционных и практических занятий: бесшумная светлая аудитория на 25 посадочных мест с доской.

Требования к аудитории для лабораторных занятий: лаборатория 60-70 м² с вытяжкой, общим и местным (над шестью рабочими столами) освещением, канализацией (холодная и горячая вода).

Требования к специализированному оборудованию: вытяжной шкаф, химически стойкая раковина, шесть лабораторных столов со стойким покрытием, один стол преподавателя, двенадцать лабораторных стульев, доска, технические и аналитические весы.

Теоретический курс:

1. Лекции, презентации
2. Контрольные тесты – диски и бумажный вариант.
3. Списки вопросов для проведения коллоквиумов.
4. Таблицы.
5. Варианты заданий для контрольных работ.
6. Варианты заданий для самостоятельной расчетной работы.