

**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

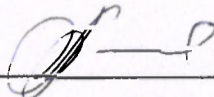
**Программа:** академический бакалавриат

**Квалификация (степень) выпускника:** бакалавр

**Форма обучения:** очная

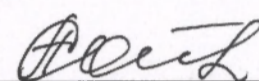
МАГАС 20 18 г.

Составители рабочей программы

профессор. к.т.н.  / Арчакова Р.Д. /

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры химии

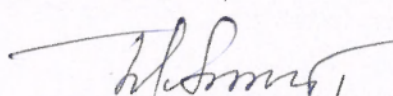
Протокол заседания № 6 от «24» апреля 2018г.

/ Заведующий кафедрой  / Султыгова З.Х. /

Рабочая программа одобрена учебно-методическим советом  
химико-биологического факультета

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

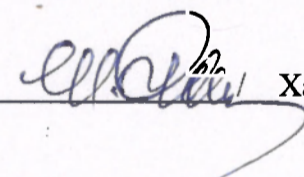
Председатель учебно-методического совета

 / 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	Коллоков.
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
	<b>Итого:</b>			<b>34</b>	<b>34</b>	<b>47</b>	

Таблица 5.2.

**Конкретизация результатов освоения дисциплины**

<i>ПК-1 Способность выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам</i>		
<b>Знать:</b> 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.	<b>Уметь:</b> 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.	<b>Владеть:</b> 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>		
<b>Знать:</b> основы фундаментальных разделов химии: неорганической химии (состав, строение, свойства веществ и соединений), орга-	<b>Уметь:</b> применять теоретические знания для решения конкретных задач в химии; пользоваться современными	<b>Владеть:</b> 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>		
<b>Знать:</b> методику расчета основных технических показателей технологического процесса.	<b>Уметь:</b> производить расчеты основных технических показателей технологического процесса.	<b>Владеть:</b> навыками расчета основных технических показателей технологического процесса.
<i>ПК-12 Способность принимать решения в стандартных ситуациях</i>		
	<b>Уметь:</b> 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. ( $\text{He}_2$ ,  $\text{Li}_2$ ,  $\text{Be}_2$ ,  $\text{B}_2$ ,  $\text{C}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{F}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{HF}$ ,  $\text{LiF}$ ).

МО малых многоатомных молекул ( $\text{BeH}_2$ ,  $\text{BH}_3$ ,  $\text{BF}_3$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{NO}_2$ ).

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  $\pi$ -электронных систем.  $\sigma$ - и  $\pi$ -МО.  $\pi$ -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 MOPAC, 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 ( $\text{NH}_3$ , $\text{H}_2\text{O}$ ).	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 м<sup>2</sup> 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.