

**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.

З.О. Батыгов 20 18 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Факультет: химико-биологический

Направление подготовки /специальность: 04.05.01

Фундаментальная и прикладная химия

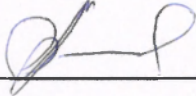
Программа: специалитет

Квалификация (степень) выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очная

МАГАС 20 18 г.

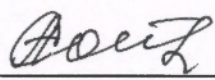
Составители рабочей программы

профессор, к.т.н.  / Арчакова Р.Д. /

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры химии

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

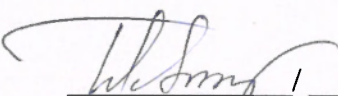
/ Заведующий кафедрой

 / Султыгова З.Х. /

Рабочая программа одобрена учебно-методическим советом
химико-биологического факультета

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

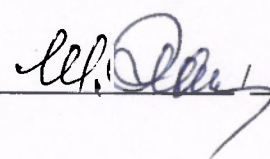
Председатель учебно-методического совета

 / 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» изучается в 4 семестре, в базовой части дисциплин 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.6	Математика	1-4
Б1.Б.7	Физика	1-4
Б1.Б.8	Информатика	2
Б1.Б.12	Неорганическая химия	1,2

Таблица 2.2.

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

Код дисциплины	Дисциплины, следующие за дисциплиной «Квантовая химия»	Семестр
Б1.Б.9	Строение вещества	5
Б1.Б.14	Органическая химия	5,6
Б1.Б.15	Физическая химия	5,6
Б1.Б.20	Физические методы исследования	8
Б1.В.ОД.4	Теоретические основы неорганической химии	9

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 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) **общепрофессиональных (ОПК)** - ОПК-1;
- б) **профессиональных (ПК)** – ПК-4, ПК-7.

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
ОПК-1	Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	4
ПК-4	Способность применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов	4
ПК-7	Готовность представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической научной печати)	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	180	180
Аудиторные занятия	84	84
Лекции	32	32
Практические занятия	50	50
Контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2
Самостоятельная работа студентов (СРС)	69	69
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	Виды учебной работы и формы контроля			
				Лекции	Практ. занят.	Самостоятельная работа	Формы контроля
1.	Становление квантовой механики и ее основные положения.	4	1,2	2	2	13	Тестир.
2	Квантово-механическое описание одноэлектронных атомов.	4	3-5	6	12	14	Опрос
3	Квантово-механическое описание многоэлект-	4	6-10	8	12	14	Коллокви.

	ронных атомов.						
4	Квантовая теория образования химической связи и химических реакций.	4	11-14	8	12	14	Опрос
5	Квантово-механическое описание различных молекулярных и кристаллических систем.	4	15-18	8	12	14	Опрос
	Итого:			32	50	69	

Таблица 5.2.

Конкретизация результатов освоения дисциплины

<i>ОПК-1 Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач</i>		
Знать: теоретические основы фундаментальных разделов химии (неорганической, органической, аналитической, физической, квантовой и др.), экологии, технологий химического производства.	Уметь: пользоваться современными представлениями основных разделов химии для объяснения взаимосвязи «состав-строение-свойства-применение-получение веществ с заданными свойствами».	Владеть: навыками решения теоретических и экспериментальных задач
<i>ПК-4 Способность применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов</i>		
Знать: основные естественно-научные законы.	Уметь: использовать основные естественнонаучные законы для описания строения и свойств веществ, для объяснения результатов химических экспериментов; для объяснения специфики поведения химических соединений; обосновывать полученные выводы, применять методы математического анализа при решении прикладных задач.	Владеть: содержанием естественно-научных законов.
<i>ПК-7 Готовность представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической научной печати)</i>		
Знать: требования к оформ-	Уметь: представлять экс-	Владеть: опытом участия в

лению рефератов, научных сообщений, статей для печати и т.п.	периментальные результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты, статьи в периодической научной печати), в устном выступлении (доклады, презентации).	научных дискуссиях.
--	--	---------------------

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 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 3 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

<i>Номер раздела (темы)</i>	<i>Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение</i>	<i>Кол-во часов</i>	<i>Формы работы</i>
1.	Основные этапы развития квантовой теории. Квантовая химия как основа современной химической науки.	6	собеседование, тестовый контроль

2.	Жесткий ротатор. Модель свободного электрона.	6	собеседование, тестовый контроль
3.	Решение уравнения Шредингера для точно решаемых задач.	6	собеседование, тестовый контроль
4.	Теория возмущений. Вариационная теорема.	6	собеседование, тестовый контроль
5.	Гелиоподобная задача. L-S связь. Определители Слетера.	6	собеседование, тестовый контроль
6.	Приближение Борна-Оппенгеймера. Подход Бейдера.	6	собеседование, тестовый контроль
7.	Уравнения метода ХФ. Базисные функции Слэтера и Гаусса. Метод МО ЛКАО	6	собеседование, тестовый контроль
8.	Корреляционные диаграммы двухатомных молекул. Активные формы кислорода.	6	собеседование, тестовый контроль
9.	МО малых многоатомных молекул (NH_3 , H_2O).	7	собеседование, тестовый контроль
10.	Диаграмма Уолша для молекулы метана. Расчет молекулы бутадиена-1,3 по методу Хюккеля.	7	собеседование, тестовый контроль
11.	Основные направления развития квантовой химии. Методы компьютерной квантовой химии.	7	собеседование, тестовый контроль

**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.