

## АННОТАЦИЯ

### рабочей программы учебной дисциплины Б1.В.06 «Квантовая химия»

#### Направление подготовки 04.03.01 «Химия (уровень бакалавриата)»

1.	<p><b>Целями изучения дисциплины «Квантовая химия» являются:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- формирование основ современной теоретической химии, ознакомление с квантово-механическими методами описания химических систем (атомов, молекул, кристаллов) и реакций.</li> <li>- 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.</li> </ul>		
2.	<p><b>Место дисциплины в структуре ОПОП ВО бакалавриата</b></p> <p>Дисциплина «Квантовая химия» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений основной профессиональной образовательной программы бакалавриата по направлению подготовки 04.03.01. «Химия (уровень бакалавриата)», изучается в 4-ом семестре.</p>		
3.	<b>Результаты освоения дисциплины «Квантовая химия»</b>		
	<b>Код и наименование компетенций</b>	<b>Индикаторы</b>	<b>Дескрипторы</b>
	<b>Универсальные компетенции (УК)</b>		
	<b>УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач</b>	<b>УК-1.1.</b> Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие.	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- понятие и классификация систем;</li> <li>- структуру и закономерности функционирования систем;</li> <li>- особенности системного подхода в научном познании;</li> <li>- понятие о системе, её целях, задачах и общих принципах;</li> <li>- основные технологии поиска и сбора информации;</li> <li>- форматы представления информации в компьютере;</li> <li>- правила использования средств связи;</li> <li>- информационно-поисковые системы и базы данных;</li> <li>- технологию осуществления поиска информации;</li> <li>- технологию систематизации полученной информации;</li> <li>- способы статистической обработки данных, представленных в различных измерительных шкалах и анализ полученных результатов;</li> <li>- виды и формы работы с педагогической и научной литературой;</li> <li>- требования к оформлению библиографии (списка литературы).</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- работать с информацией, представленной в различной форме;</li> <li>- обрабатывать данные средствами стандартного программного обеспечения;</li> </ul>
		<b>УК-1.2.</b> Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи.	
		<b>УК-1.3.</b> Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов.	
		<b>УК-1.4.</b> При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения.	
		<b>УК-1.5</b> Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки.	

			<ul style="list-style-type: none"> <li>- синтезировать информацию, представленную в различных источниках; -</li> <li>- выбирать источники информации, адекватные поставленным задачам и соответствующие научному мировоззрению;</li> <li>- осуществлять поиск информации;</li> <li>- интерпретировать и ранжировать информацию, требуемую для решения поставленной задачи.</li> </ul> <p><b>Владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- персональным компьютером и поисковыми сервисами;</li> <li>- методиками аналитико-синтетической обработки информации из различных информационно-поисковых систем (предметизация, аннотирование, реферирование).</li> </ul>
<b>Профессиональные компетенции (ПК)</b>			
	<b>ПК-1</b> Способен проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты.	<b>ПК-1.1.</b> Демонстрирует знания основных методов обработки химической информации и требований к отчетам и проектам; назначения наиболее распространенных средств автоматизации информационной деятельности; назначения и функции операционных систем;	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- основные методов обработки химической информации и требований к отчетам и проектам;</li> <li>- назначения наиболее распространенных средств автоматизации информационной деятельности;</li> <li>- назначения и функции операционных систем.</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- использовать современные методы для решения химических задач;</li> <li>- работать с базами данных в компьютерных сетях;</li> <li>- использовать полученные знания для обработки химической информации и составления отчетов и проектов;</li> <li>- использовать базовые знания в области естественных наук при решении задач химического профиля.</li> </ul> <p><b>Владеть:</b></p> <p>навыками использования приобретенных знаний и умений в практической деятельности и повседневной жизни;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- навыками эффективной организации индивидуального информационного пространства: эффективного применения информационных образовательных ресурсов в учебной деятельности, создания баз данных, применения методов математического моделирования для решения профессиональных задач; методами статистической обработки результатов</li> </ul>
		<b>ПК-1.2.</b> Использует современные методы для решения химических задач, работает с базами данных в компьютерных сетях; использует полученные знания для обработки химической информации и составления отчетов и проектов; использует базовые знания в области естественных наук при решении задач химического профиля;	
		<b>ПК- 1.3.</b> Владеет навыками использования приобретенных знаний и умений в практической деятельности и повседневной жизни; навыками эффективной организации индивидуального информационного пространства: эффективного применения информационных образовательных ресурсов в учебной деятельности, создания баз данных, применения методов математического моделирования для решения профессиональных задач; методами статистической обработки результатов	

		экспериментальных исследований.	нальных задач; - методами статистической обработки результатов экспериментальных исследований.
<b>4.</b>	<b>Структура и содержание дисциплины</b>		
	<b>4.1. Структура дисциплины</b>		
	<b>Вид учебной работы</b>	<b>Всего часов</b>	<b>4 семестр</b>
	Общая трудоемкость дисциплины	252	252
	Аудиторные занятия	174	174
	Лекции	72	72
	Лабораторные занятия	102	102
	Самостоятельная работа студентов	51	51
	Контроль	27	27
	<b>4.2. Содержание дисциплины</b>		
	<p>Предмет квантовой механики. Основные этапы развития квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики. Операторы, их свойства. Эрмитовы операторы, их собственные значения и собственные функции. Вырождение.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>Приближенные методы решения квантовомеханических задач. Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие вырождения энергетических уровней. Вариационная теорема и линейный и нелинейный вариационные методы.</p> <p>Многоэлектронный атом. Квантовые числа многоэлектронного атома. Термы многоэлектронного атома. Правила Хунда. L,S-связь. Правила и орбитали Слэтера-Зенера.</p> <p>Переходы под влиянием электромагнитного излучения. Правила отбора, коэффициенты Эйнштейна. Влияние внешнего поля. Эффекты Штарка, Зеемана и Пашена-Бака.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>Классификация состояний и МО по симметрии. Расчеты двухатомных молекул. Корреляционные диаграммы двухатомных молекул. МО двухатомных гомо- и гетероядерных молекул. (<math>\text{He}_2</math>, <math>\text{Li}_2</math>, <math>\text{Be}_2</math>, <math>\text{B}_2</math>, <math>\text{C}_2</math>, <math>\text{N}_2</math>, <math>\text{O}_2</math>, <math>\text{F}_2</math>, <math>\text{CO}</math>, <math>\text{HF}</math>, <math>\text{LiF}</math>).</p> <p>МО малых многоатомных молекул (<math>\text{BeH}_2</math>, <math>\text{BH}_3</math>, <math>\text{BF}_3</math>, <math>\text{NH}_3</math>, <math>\text{H}_2\text{O}</math>, <math>\text{CH}_4</math>, <math>\text{C}_2\text{H}_4</math>, <math>\text{NO}_2</math>).</p> <p>Элементы и операции симметрии. Точечные группы. Таблицы характеров. Разложение приводимых представлений. Оператор проектирования.</p> <p>Качественный подход к анализу геометрических конфигураций различных состояний молекул. Корреляционные диаграммы Уолша. Простой метод Хюккеля (МОХ) для <math>\pi</math>-электронных систем. <math>\sigma</math>- и <math>\pi</math>-МО. <math>\pi</math>-Электронное приближение. Расчеты простейших углеводородных и гетероатомных сопряженных систем методом МОХ.</p> <p>Орбитали симметрии и эквивалентные орбитали. Гибридизация в базисе функций s-, p- и d-типов. Локализованные МО и классическая теория химического строения.</p> <p>Квантовохимическое описание химических реакций. Переходное состояние на поверхности потенциальной энергии (ППЭ). индексы реакционной способности (ИРС). Теория граничных орбиталей</p>		

	<p>Фукуи. Типы химических реакций. Согласованные (концертные) и ступенчатые процессы. Термические и фотохимические реакции.</p> <p>Сохранение орбитальной симметрии (принцип Вудворда-Хоффмана). Примеры применения принципа и границы его применимости.</p> <p>Основные направления развития квантовой химии. Методы компьютерной квантовой химии. Полуэмпирические и неэмпирические расчеты. Современные основные программные квантовохимические комплексы MOPAC, Gaussian, HyperChem.</p>
<b>5.</b>	<b>Образовательные технологии</b>
	<p>При подготовке специалистов-химиков используются следующие основные формы проведения учебных занятий:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- интерактивные лекции;</li> <li>- лекции пресс-конференции;</li> <li>- тренинги и семинары про развитию профессиональных навыков;</li> <li>- групповые, научные дискуссии, дебаты</li> </ul>
<b>6.</b>	<b>Используемые ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Internet; информационные технологии, программные средства и информационно-справочные системы</b>
	<p><b>Информационное обеспечение базы данных, информационно-справочные и поисковые системы</b></p> <p><a href="http://fizrast.ru/sitemap.html">http://fizrast.ru/sitemap.html</a>  <a href="http://www.don-agro.ru">http://www.don-agro.ru</a>  <a href="http://xn-80abucjiihbv9a.xn-plai/">http://xn-80abucjiihbv9a.xn-plai/</a>  <a href="http://www.agroxxi.ru/">http://www.agroxxi.ru/</a> (РГБ)  <a href="http://elibrary.rsl.ru">http://elibrary.rsl.ru</a> Научная электронная библиотека  <a href="http://elibrary.ru/default.asp">http://elibrary.ru/default.asp</a> Российская национальная библиотека  <a href="http://primo.nlr.ru">http://primo.nlr.ru</a> <a href="http://nbmgu.ru">http://nbmgu.ru</a> Электронная библиотека Российской государственной библиотеки.</p>
<b>7.</b>	<b>Формы текущего контроля</b>
	тестовый контроль, контрольные работы, коллоквиумы
<b>8.</b>	<b>Форма промежуточного контроля</b>
	экзамен

Разработчик: к.т.н. профессор кафедры химии Арчакова Р.Д.