

АННОТАЦИЯ

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

Направление подготовки 04.03.01 «Химия (уровень бакалавриата)»

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

			<ul style="list-style-type: none"> - синтезировать информацию, представленную в различных источниках; - - выбирать источники информации, адекватные поставленным задачам и соответствующие научному мировоззрению; - осуществлять поиск информации; - интерпретировать и ранжировать информацию, требуемую для решения поставленной задачи. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - персональным компьютером и поисковыми сервисами; - методиками аналитико-синтетической обработки информации из различных информационно-поисковых систем (предметизация, аннотирование, реферирование).
Профессиональные компетенции (ПК)			
	ПК-1 Способен проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты.	ПК-1.1. 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>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - основные методов обработки химической информации и требований к отчетам и проектам; - назначения наиболее распространенных средств автоматизации информационной деятельности; - назначения и функции операционных систем. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - использовать современные методы для решения химических задач; - работать с базами данных в компьютерных сетях; - использовать полученные знания для обработки химической информации и составления отчетов и проектов; - использовать базовые знания в области естественных наук при решении задач химического профиля. <p>Владеть:</p> <p>навыками использования приобретенных знаний и умений в практической деятельности и повседневной жизни;</p> <ul style="list-style-type: none"> - 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
		ПК-1.2. 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;	
		ПК- 1.3. 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.
4.	Структура и содержание дисциплины		
	4.1. Структура дисциплины		
	Вид учебной работы	Всего часов	4 семестр
	Общая трудоемкость дисциплины	288	288
	Аудиторные занятия	156	156
	Лекции	54	54
	Лабораторные занятия	102	102
	Самостоятельная работа студентов	105	105
	Контроль	27	27
	4.2. Содержание дисциплины		
	<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. (He_2, Li_2, Be_2, B_2, C_2, N_2, O_2, F_2, CO, HF, LiF).</p> <p>МО малых многоатомных молекул (BeH_2, BH_3, BF_3, NH_3, H_2O, CH_4, C_2H_4, NO_2).</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 π-электронных систем. σ- и π-МО. π-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>
5.	Образовательные технологии
	<p>При подготовке специалистов-химиков используются следующие основные формы проведения учебных занятий:</p> <ul style="list-style-type: none"> - интерактивные лекции; - лекции пресс-конференции; - тренинги и семинары про развитию профессиональных навыков; - групповые, научные дискуссии, дебаты.
6.	Используемые ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Internet; информационные технологии, программные средства и информационно-справочные системы
	<p>Информационное обеспечение баз данных, информационно-справочные и поисковые системы</p> <p>http://fizrast.ru/sitemap.html</p> <p>http://www.don-agro.ru</p> <p>http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/</p> <p>http://www.agroxxi.ru/ (РГБ)</p> <p>http://elibrary.rsl.ru Научная электронная библиотека</p> <p>http://elibrary.ru/default.asp Российская национальная библиотека</p> <p>http://primo.nlr.ru http://nbmgu.ru Электронная библиотека Российской государственной библиотеки.</p>
7.	Формы текущего контроля
	тестовый контроль, контрольные работы, коллоквиумы
8.	Форма промежуточного контроля
	экзамен

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