

АННОТАЦИЯ

рабочей программы учебной дисциплины Б1.В.11 «Квантовая химия»

Направление подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

1.	Целями изучения дисциплины «Квантовая химия» являются: <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.	Место дисциплины в структуре ОПОП ВО специалитета Дисциплина «Квантовая химия» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1 основной профессиональной образовательной программы специалитета по направлению подготовки 04.05.01. «Фундаментальная и прикладная химия». Изучается в 4-ом семестре		
3.	Результаты освоения дисциплины «Квантовая химия»		
	Код и наименование компетенций	Индикаторы	Дескрипторы
	Универсальные компетенции (УК)		
	УК-3 Способен организовывать и руководить работой команды, выработывая командную стратегию для достижения поставленной цели	УК-3.1. Понимает эффективность использования стратегии сотрудничества для достижения поставленной цели, определяет свою роль в команде	Знать – методики формирования команд; методы разработки командной стратегии и эффективного руководства коллективами; основные теории лидерства и стили руководства. Уметь – разрабатывать командную стратегию; формулировать задачи членам команды для достижения поставленной цели; применять эффективные стили руководства командой. Владеть: – умением анализировать, проектировать и организовывать коммуникации в команде для достижения поставленной цели; методами организации и управления коллективом.
		УК-3.2. Понимает особенности поведения выделенных групп людей, с которыми работает /взаимодействует, учитывает их в своей деятельности (выбор категорий групп людей осуществляется образовательной организацией в зависимости от целей подготовки – по возрастным особенностям, по этническому или религиозному признаку, социально незащищенные слои населения и т.п.)	
		УК-3.3. Прогнозирует результаты (последствия) личных действий и планирует последовательность шагов для достижения заданного результата	
		УК-3.4. Эффективно взаимодействует с другими членами команды, в т.ч. участвует в обмене информацией, знаниями и опытом, и презентации результатов работы команды	
	Профессиональные компетенции (ПК)		
	ПК-3 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-	ПК-3.1 Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных	Знать: методы ведения конструкторских работ и технологических испытаний

	конструкторские работы и технологические испытания	базах данных (в т.ч. патентных)	Уметь: оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-конструкторские работы и технологические испытания Владеть: знаниями по видам конструкторских работ и технологических испытаний в выбранной области профессии
		ПК-3.2. Составляет обзор литературных источников по заданной теме, оформляет отчеты о выполненной работе по заданной форме	
4.	Структура и содержание дисциплины		
	4.1. Структура дисциплины		
	Вид учебной работы	Всего часов	4 семестр
	Общая трудоемкость дисциплины	180	180
	Аудиторные занятия	88	88
	Лекции	54	54
	Лабораторные занятия	34	34
	Самостоятельная работа студентов	65	65
	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. (He₂, Li₂, Be₂, B₂, C₂, N₂, O₂, F₂, CO, HF, LiF).</p> <p>МО малых многоатомных молекул (BeH₂, BH₃, BF₃, NH₃, H₂O, CH₄, C₂H₄, NO₂).</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</p>		

	<p>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 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 базы данных, информационно-справочные и поисковые системы</p> <p>http://fizrast.ru/sitemap.html http://www.don-agro.ru http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/ http://www.agroxxi.ru/ (РГБ) http://elibrary.rsl.ru Научная электронная библиотека http://elibrary.ru/default.asp Российская национальная библиотека http://primo.nl.ru http://nbmgu.ru Электронная библиотека Российской государственной библиотеки</p>
7.	Формы текущего контроля
	собеседование, тестовый контроль, коллоквиумы
8.	Форма промежуточного контроля
	экзамен

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