

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
материаловедения и индустрии наносистем



В.М. Иевлев
20.06.2018г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.04. Квантовая химия

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:**
04.03.02 Химия, физика и механика материалов
- 2. Профиль подготовки/специализация:**

- 3. Квалификация (степень) выпускника:** бакалавр
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** Материаловедения и индустрии наносистем
- 6. Составители программы:** Даринский Борис Михайлович, доктор физико-математических наук профессор
- 7. Рекомендована:** Научно-методическим советом химического факультета, протокол №5 от 24.05.2018
- 8. Учебный год:** 2021-2022 **Семестр(ы):** 7

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Цели дисциплины: раскрыть принципы квантовохимического описания строения химических частиц (атомов, молекул, полимеров); научить интерпретировать результаты квантовохимических расчетов химических частиц.

В задачи курса входит: познакомить студентов с экспериментальными основами квантовой химии; изучить приближенные методы квантовой химии; познакомить с решением простейших квантовохимических задач и с расчетами простых молекул; определить квантовохимические аналоги основных понятий классической теории химического строения.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Б1, вариативная часть

При освоении данного курса обучающийся должен владеть основами теории фундаментальных разделов химии; способностью применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, иметь навыки самостоятельной обработки результатов измерений, необходимые для установления природы явления и определения его количественных характеристик.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-1	Способность использовать современные методы химии, физики, математики механики, биологии на уровне, необходимом для приобретения новых знаний с их использованием и решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций и имеющих естественнонаучное содержание.	Знать: методы описания электронной структуры атомов, основные закономерности изменения характеристик атомов в таблице Менделеева, квантовые модели электронной структуры уметь: использовать знания для построения моделей, проведения компьютерных расчетов и интерпретации полученных результатов молекул, нанокластеров и кристаллических твердых тел. Владеть: навыками проведения самостоятельных исследований в области теоретических расчетов молекулярных и твердотельных систем, интерпретации экспериментальных результатов на основе представлений об электронном строении объекта.
ОПК-2	способностью использовать практические навыки экспериментальной работы в областях неорганической, аналитической, органической и физической химии; химии и физики высокомолекулярных соединений; структурной химии и кристаллохимии; общей физики; физики конденсированного состояния	знать: методы квантового расчета и интерпретации результатов для молекул и твердых тел. Уметь: использовать знания для построения моделей, проведения компьютерных расчетов и интерпретации полученных результатов молекул, нанокластеров и кристаллических твердых тел. Владеть: навыками интерпретации экспериментальных результатов на основе представлений об электронном строении объекта.
ОПК-4	способностью использования феноменологических, математических и численных (альтернативных) моделей для описания и прогнозирования различных	знать: Классификацию различных методов компьютерных расчетов молекул и твердых тел, методики проведения расчетов, интерпретацию полученных результатов. Уметь: использовать знания для адекватной постановки задач,

	явлений, осуществление их качественного и количественного анализа	проведения расчетов, интерпретации результатов. Владеть: навыками проведения самостоятельных квантовохимических исследований в области молекулярных структур и твердых тел.
ПК-1	способностью использовать основные современные методологические, теоретические и экспериментальные подходы к проведению научных исследований по выбранному профилю программы	знать: методы описания электронной структуры атомов, основные закономерности изменения характеристик атомов в таблице Менделеева, квантовые модели электронной структуры Уметь: использовать знания для адекватной постановки задач, проведения расчетов, интерпретации результатов Владеть: навыками проведения самостоятельных исследований в области теоретических расчетов молекулярных и твердотельных систем

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 4/144.

Форма промежуточной аттестации – экзамен.

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		7	№ семестра	...
Аудиторные занятия	72	72		
в том числе: лекции	36	36		
практические	36	36		
лабораторные				
Самостоятельная работа	36	36		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час./ экзамен – 36 час.)		Экзамен 36		
Итого:	144	144		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	Многоэлектронные атомы	Вариационный принцип. Решение уравнения Шредингера. Метод самосогласованного поля. Атомные орбитали и их характеристики. Детерминант Слэтера. Метод Хартри-Фока.
1.2	Молекулы	Приближение Борна-Оппенгеймера. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана. Неэмпирическая квантовая химия. Базисные функции для неэмпирических расчетов. Минимальный и расширенный атомные базисные наборы. Методы квантовой химии, основанные на частичном и полном пренебрежении дифференциальным перекрыванием. π -электронное приближение. Простой и расширенный методы Хюккеля. Метод Парризера-Парра-Попла. Колебательные и вращательные спектры молекул.
1.3	Химическая связь	Симметрия молекул. Молекулярные орбитали и их симметричная классификация. Электронные конфигурации двухатомных молекул. Пространственное распределение электронной плотности. Теорема Гельмана-Фейнмана. Теорема вириала. Электронное строение многоатомных молекул. Локализация и гибридизация орбиталей. Модель отталкивания электронных пар. Химическая связь в координационных соединениях. Теория кристаллического поля. Энергия стабилизации кристаллическим полем.

		Теория поля лигандов.
1.4	Электронные состояния твердых тел	Одноэлектронные волновые функции в кристаллах. Зонная структура твердых тел. Электронное строение кристаллических и аморфных тел.
1.5	Химические реакции	Реакционная способность молекул. Поверхность потенциальной энергии молекул. Поверхность потенциальной энергии для взаимодействующих частиц. Динамика элементарного акта. Правило Вудворда-Хоффмана. Переходное состояние. Индексы реакционной способности молекул.
2. Практические занятия		
2.1	Многоэлектронные атомы	Атомные термы различных атомов, основное и возбужденные состояния, вырождение состояний в электрическом и магнитном полях
2.2	Молекулы	Энергия электронов в двухатомных молекулах, строение многоатомных молекул. Расчет волновых функций и характеристик молекул.
2.3	Химическая связь	Построение гибридных молекулярных орбиталей в молекулах, нахождение симметрий молекул разного состава
2.4	Электронные состояния твердых тел	Электронное строение металлов, диэлектриков и полупроводников. Модель свободных электронов, метод сильной связи.
2.5	Химические реакции	Расчет энергетических барьеров химических реакций

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Многоэлектронные атомы	8	8	0	8	24
2	Молекулы	10	8	0	8	26
3	Химическая связь	8	12	0	8	28
4	Электронные состояния твердых тел	8	4	0	6	18
5	Химические реакции	2	4	0	6	12
	Итого:	36	36	0	36	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

Организация изучения дисциплины предполагает:

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
- выполнение практических заданий;
- текущий контроль успеваемости в форме устного опроса по основным разделам дисциплины.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В.И. Барановский . – М. : Академия, 2008 .– 382 с.
2	Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е.В. Бутырская. – М. : СОЛОН-ПРЕСС, 2011. – 218 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	Симкин Б.Я. Задачи по теории строения молекул : учебное пособие для студ. вузов / Б.Я. Симкин, М.Е. Клецкий, М.Н. Глуховцев .— Ростов н/Д : Феникс, 1997 .— 270 с.
4	Минкин В.И. Теория строения молекул : Учеб. пособие для студ. вузов / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин,

	Р.М.Миняев .— 2-е изд., перераб. и доп. — Ростов н/Д : Феникс, 1997 .— 557 с.
5	Грибов Л.А. Квантовая химия : Учеб. для студ. хим. и биолог. спец. вузов .— М. : Гардарики, 1999 .— 389 с.
6	Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия : Учебник для студ. хим. фак. ун-тов / Н.Ф.Степанов .— М. : Мир, 2001 .— 518 с.

в) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:

№ п/п	Источник
7	Образовательный сайт "Физическая химия ОН-ЛАЙН" http://kozaderov.professorjournal.ru
8	Интернет портал образовательных ресурсов http://window.edu.ru

* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договора у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	
2	

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Персональные компьютеры с доступом в Интернет; мультимедийный проектор BENQ, экран, ноутбук.

19. Фонд оценочных средств:

19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС* (средства оценивания)
ОПК-1 Способность использовать современные методы химии, физики, математики механики, биологии на уровне, необходимом для приобретения новых знаний с их использованием и решения задач, возникающих при выполнении профессиональных	знать методы описания электронной структуры атомов, основные закономерности изменения характеристик атомов в таблице Менделеева, квантовые модели электронной структуры .	Многоэлектронные атомы Молекулы Химическая связь Электронные состояния твердых тел	Устный опрос
	уметь: использовать знания для построения моделей, проведения компьютерных расчетов и интерпретации полученных результатов молекул, нанокластеров и кристаллических твердых тел.	Многоэлектронные атомы Молекулы Химическая связь Электронные состояния твердых тел	Практическое задание № 1,2

<p>функций и имеющих естественнонаучное содержание.</p>	<p>владеть: навыками проведения самостоятельных исследований в области теоретических расчетов молекулярных и твердотельных систем, интерпретации экспериментальных результатов на основе представлений об электронном строении объекта.</p>	<p>Многоэлектронные атомы Молекулы Химическая связь Электронные состояния твердых тел</p>	<p>Практическое задание № 1,2</p>
<p>ОПК-2 способностью использовать практические навыки экспериментальной работы в областях неорганической, аналитической, органической и физической химии; химии и физики высокомолекулярных соединений; структурной химии и кристаллохимии; общей физики; физики конденсированного состояния</p>	<p>знать: методы квантового расчета и интерпретации результатов для молекул и твердых тел.</p>	<p>Молекулы Электронные состояния твердых тел Химические реакции</p>	<p>Устный опрос</p>
	<p>уметь: использовать знания для построения моделей, проведения компьютерных расчетов и интерпретации полученных результатов молекул, нанокластеров и кристаллических твердых тел.</p>	<p>Молекулы Электронные состояния твердых тел Химические реакции</p>	<p>Практическое задание № 1,2</p>
	<p>владеть: навыками интерпретации экспериментальных результатов на основе представлений об электронном строении объекта.</p>	<p>Молекулы Электронные состояния твердых тел Химические реакции</p>	<p>Практическое задание № 1,2</p>
<p>ОПК-4 способностью использования феноменологических, математических и численных</p>	<p>знать: Классификацию различных методов компьютерных расчетов молекул и твердых тел, методики проведения расчетов, интерпретацию полученных результатов.</p>	<p>Молекулы Электронные состояния твердых тел Химические реакции</p>	<p>Устный опрос</p>
	<p>уметь: использовать знания для адекватной постановки задач, проведения расчетов, интерпретации результатов.</p>	<p>Молекулы Электронные состояния твердых тел Химические реакции</p>	<p>Практическое задание № 1,2</p>
	<p>владеть: навыками проведения самостоятельных квантовохимических исследований в области молекулярных структур и твердых тел.</p>	<p>Молекулы Электронные состояния твердых тел Химические реакции</p>	<p>Практическое задание № 1,2</p>

ПК-1 способностью использовать основные современные методологические, теоретические и экспериментальные подходы к проведению научных исследований по выбранному профилю программы	знать: методы описания электронной структуры атомов, основные закономерности изменения характеристик атомов в таблице Менделеева, квантовые модели электронной структуры Уметь: использовать знания для адекватной постановки задач, проведения расчетов, интерпретации результатов Владеть: навыками проведения самостоятельных исследований в области теоретических расчетов молекулярных и твердотельных систем	Многоэлектронные атомы Молекулы Химическая связь Электронные состояния твердых тел	Практическое задание № 1,2
Промежуточная аттестация		КИМ	

* В графе «ФОС» в обязательном порядке перечисляются оценочные средства текущей и промежуточной аттестаций.

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Пример:

Для оценивания результатов обучения на экзамене используются следующие показатели (ЗУНы из 19.1):

- 1) знание электронного строения элементов таблицы Менделеева;
- 2) знание методов исследований строения молекул;
- 3) знание методов компьютерных вычислений электронной структуры молекул
- 4) умение использовать знания для исследования электронных характеристик и свойств широкого круга объектов;

Для оценивания результатов обучения на экзамене используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом данной области науки, способен иллюстрировать ответ примерами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения в области электронного строения и химической связи.	Повышенный уровень	Отлично
Обучающийся владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), способен использовать знания для интерпретации эффектов в квантовой химии, допускает отдельные ошибки при рассмотрении конкретных способов	Базовый уровень	Хорошо
Обучающийся владеет частично теоретическими основами дисциплины, допускает ошибки в интерпретации эффектов на квантовом уровне.	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки.	–	Неудовлетворительно

19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Перечень вопросов к экзамену:

1. Решение уравнения Шредингера для электрона в кулоновском поле. Энергетический спектр и волновые функции атома водорода.
2. Спиновые состояния электрона. Спин-орбитальное взаимодействие.
3. Энергетический спектр и волновые функции атома водорода с учетом спин-орбитального взаимодействия.
4. Волновая функция система многих частиц. Оператор перестановки частиц. Фермионы и бозоны. Принцип Паули.
5. Зависимость энергии от спина системы электронов.
6. Электронные конфигурации основных и возбужденных состояний элементов таблицы Менделеева.
7. Волновые функции и термы атомов. Диаграммы Гротриана.
8. Конфигурации из валентных электронов. LS- и JJ-связь.
9. Гибридизация атомных орбиталей.
10. Статистическая модель атома.
11. Вариационный принцип в квантовой механике.
12. Уравнение Хартри-Фока. Самосогласованный потенциал. Теорема Купманса.
13. Адиаботическое приближение в квантовой теории систем многих частиц. Зависимость уровней энергии от положения ядер. Изоэнергетические поверхности.
14. Одночастичное представление волновых функций многоэлектронной системы. Функциональные базисы. Молекулярные орбитали.
15. Метод Хартри-Фока-Рутана.
16. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока.
17. Метод конфигурационного взаимодействия.
18. Теория функционала плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона. Уравнение Кона-Шема.
16. Симметрия и энергетические термы двуатомных молекул.
17. Химическая связь в двухатомных молекулах. Теорема Гельмана-Фейнмана.
18. Группы симметрии и энергетические термы многоатомных молекул.
19. Пространственные конфигурации молекул и ионов, теория Гиллеспи.
20. Химическая связь в координационных соединениях. Теория кристаллического поля.
21. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Теория поля лигандов.
22. Кластерное приближение и его применение в квантовой химии координационных соединений.
23. Эффект Яна-Теллера в молекулах и молекулярных комплексах.
24. Одноэлектронные волновые функции в кристаллах. Волны Блоха. Зонная структура кристаллов. Уровень Ферми. Плотность состояний.
25. Волновые функции металлов и диэлектриков. Модели свободных и сильно связанных валентных электронов.
26. Электронная структура молекулярных кристаллов.
27. Электронная структура аморфных материалов.
28. Электронная структура магнитных материалов.
29. Квантово-химическое описание химических реакций в газовой фазе. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ) химической реакции. Путь химической реакции, координата реакции. Переходное состояние или активированный комплекс.
29. Расчет реагентов, продуктов, перед- и послереакционных комплексов.
30. Орбитальные модели взаимодействия молекул с поверхностью. Хемосорбция.
31. Химические реакции в твердых телах. Роль дефектов структуры.

19.3.2 Перечень практических заданий

1. Расчет электронной структуры атомов по программе GASSIAN
2. Расчет электронной структуры простых молекул по программе GASSIAN

19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме устного опроса, защиты рефератов выполнения практического задания. Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний.

При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.