

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Институт химии

УТВЕРЖДАЮ
Директор Института химии
Проф., д.х.н. Горячева И.Ю.
И.Ю. Горячева
"27" сентября 2021 г.

Рабочая программа дисциплины
Квантовая химия

Направление подготовки магистратуры
04.03.01- Химия

Профили подготовки бакалавриата
Физическая химия
Аналитическая химия и химическая экспертиза
Химия низко- и высокомолекулярных органических веществ

Квалификация (степень) выпускника

Бакалавр

Форма обучения
очная

Саратов,
2021

Статус	ФИО	Подпись	Дата
Преподаватель-разработчик	Бурмистрова Наталия Анатольевна	<i>И.Ю. Горячева</i>	27.09.21
Председатель НМК	Крылатова Яна Георгиевна	<i>Яна Крылатова</i>	27.09.21
Заведующий кафедрой	Черкасов Дмитрий Геннадьевич	<i>Д.Г. Черкасов</i>	27.09.21
Специалист Учебного управления			

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Квантовая химия» является изучение основных положений квантовой химии, необходимых для понимания теоретического аппарата квантовой механики, понятий и современных методов квантовой химии, чтобы ясно представлять, какими способами и на основе каких приближений можно рассчитывать молекулы и интерпретировать результаты химического эксперимента, без которых невозможно глубокое понимание и решение проблем современной химии.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Квантовая химия» (Б1.О.09) относится к Обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» рабочего учебного плана ООП по направлению бакалавриата 04.03.01 Химия профили «Аналитическая химия и химическая экспертиза», «Химия низко- и высокомолекулярных органических веществ», «Физическая химия» и изучается в 6 семестре.

Для освоения программы по дисциплине «Квантовая химия» студент должен знать основы высшей математики и физики, полученные в предшествующих дисциплинах бакалавриата «Математика», «Физика», владеть основами работы на компьютере в операционных системах семейства Windows, полученными в рамках курса «Информатика».

Освоение дисциплины «Квантовая химия» необходимо при выполнении и защите выпускной квалификационной работ по направлению 04.03.01 Химия, при решении научно-исследовательских задач в будущей профессиональной деятельности.

3. Результаты обучения по дисциплине

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
УК-1. Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	1.1_Б.УК-1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие. Осуществляет декомпозицию задачи. 3.1_Б.УК-1. Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивая их достоинства и недостатки.	знать основные приемы работы по поиску и анализу литературных данных, анализу данных полученных при использовании методов квантовой химии уметь: проводить критический анализ литературных результатов квантово-химических расчетов владеть: методами и подходами использования квантово-химических методов при решении различных химических задач
ОПК-3. Способен	ОПК-3.1. Применяет	знать

<p>применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники</p>	<p>теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности ОПК-3.3. Решает задачи химической направленности с использованием специализированного программного обеспечения</p>	<p>основные законы и приближения квантовой механики современную теорию строения молекул, понимать природу и особенности химической связи; уметь: использовать полученные знания для оценки строения молекул, природы химической связи, установления корреляций строение – свойства молекул, объяснять на этой основе реакционную способность молекул и механизм реакций; владеть: современными квантово-химическими методами расчета молекул на основе программных средств с помощью компьютеров</p>
<p>ПК-1. Владеет системой фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p>ПК-1.1. Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования. ПК-1.3. Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин</p>	<p>знать основы, возможности и способы реализации методов квантовой химии уметь: интерпретировать результаты квантово-химических расчетов владеть: методологией использования квантово-химических методов</p>

4. Структура и содержание дисциплины «Квантовая химия»

Общая трудоемкость дисциплины составляет **5** зачетных единиц, **180** часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)						Всего	Формы текущего контроля успеваемости (<i>по неделям семестра</i>) Формы промежуточной аттестации (<i>по семестрам</i>)
				Лекции	Лаборат. раб.		СР	Иная контактная работа	Контроль		
					Общая трудоемкость	Из них – практическая подготовка					
1	Введение. Основы квантовой механики.	6	1	2	4	2	2				Устный опрос.
		6	2	2	4	2	2				Письменный отчет в лабораторном журнале.
2	Постулаты квантовой механики. Математический аппарат.	6	3	2	4	2	2				Устный опрос.
		6	4	2	4	2	2				Письменный отчет в лабораторном журнале.
3	Волновая функция и ее свойства	6	5	2	4	2	2				Проверочная работа.
4	Уравнение Шредингера.	6	6	2	4	2	2				Проверочные контрольные задания по материалам лекций 1 – 2.
5	Понятие модельного подхода в квантовой механике.	6	7	2	4	2	2				Устный опрос.
6	Квантово- механическое описание атома водорода.	6	8	2	4	2	2				Проверочные контрольные задания по материалам лекций 3-4.

7	Системы тождественных частиц. Принцип Паули.	6	9	2	4	2	2				Письменный отчет в лабораторном журнале.
8	Основные приближения квантовой химии.	6	10	2	4	2	2				
		6	11	2	4	2	2				
9	Уравнения Хартри-Фока. Теорема Купманса. Метод самосогласованного поля (ССП)	6	12	2	4	2	2				Устный опрос.
		6	13	2	4	2	2				Проверочные контрольные задания по материалам лекций 6-8.
10	Приближение МО ЛКАО. Уравнения Хартри-Фока-Рутана.	6	14	2	4	2	2				Письменный отчет в лабораторном журнале.
		6	15	2	4	2	2				
11	Теория возмущений в квантовой химии	6	16	2	4	2	2				
12	Приближенные атомные орбитали.	6	17	2	4	2	2				Проверочные контрольные задания по материалам лекций 10 – 18.
13	<i>Ab-initio</i> и <i>DFT</i> квантово-химические методы расчета молекул.	6	18	2	4	2	2				Письменный отчет в лабораторном журнале.
	Промежуточная аттестация	6								36	Экзамен
	Итого:	6		36	72	36	36			36	180

Содержание дисциплины

1. Введение. Основы квантовой механики. Основные этапы развития квантовой химии. Роль в развитии современной теоретической химии и перспективы дальнейшего развития квантовой химии. Корпускулярно-волновой дуализм.

2. Постулаты квантовой механики. Математический аппарат. Основные теоремы квантовой механики. Операторы и их свойства. Операторное уравнение. Свойства собственных значений и собственных функций операторных уравнений. Основные операторы квантовой химии (координатное представление). Матричное представление операторов. Свойства матриц. Операторное уравнение в матричной форме.

3. Волновая функция и ее свойства. Вероятность результатов измерений физических величин, средние значения наблюдаемых величин.

4. Уравнение Шредингера. Временное уравнение Шредингера.. Стационарные состояния. Представление в матричной форме. Уравнение Шредингера для атомных и молекулярных систем.

5. Понятие модельного подхода в квантовой механике. Принцип дополнительности. Движение точки в заданном потенциале. Частицы в потенциальной яме (одномерной и трехмерной). Гармонический осциллятор. ИК спектры двухатомных молекул. Потенциальные барьеры. Туннельный эффект. Контактная разность потенциалов. Холодная эмиссия электронов. Частица в центральном поле.

6. Квантовомеханическое описание атома водорода. Атомная орбитали и их характеристики.

7. Системы тождественных частиц. Принцип Паули. Симметричные и антисимметричные функции. Детерминант Слейтера.

8. Основные приближения квантовой химии. Адиабатическое приближение. Уравнение Шредингера для движения электронов в поле ядер. Одноэлектронное приближение. Уравнения Хартри. Средняя энергия в одноэлектронном приближении. Кулоновские и обменные интегралы. Корреляция электронов.

9. Уравнения Хартри-Фока. Теорема Купманса. Метод самосогласованного поля (ССП). Электронные оболочки. Уравнение Хартри-Фока для молекул с закрытыми оболочками. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока. Квантовохимическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока. Электронные конфигурации атомов с точки зрения квантовой химии.

10. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Хартри-Фока-Рутана. Вариационный принцип и решение уравнения Шредингера. Молекулярные интегралы.

11. Теория возмущений в квантовой химии. Методы конфигурационного взаимодействия. Точность учета электронной корреляции. Понятие атомного базиса. Минимальный и расширенный атомные базисы, Поляризованные и диффузные функции..

12. Приближенные атомные орбитали. Правила Слейтера.

13. Ab-initio и DFT квантово-химические методы расчета молекул. Иерархия методов квантовой химии. Расчеты свойств молекул, точность расчета.

5. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины.

При освоении дисциплины "Квантовая химия", предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм приобретения новых знаний. Образовательный процесс ориентирован как на теоретическую подготовку бакалавров, так и на приобретение ими практических навыков.

При освоении дисциплины используются следующие образовательные технологии:

- лекции, в том числе с мультимедийными презентациями;
- лабораторные работы;
- проверочные контрольные задания, в том числе в виде компьютерного тестирования;
- самостоятельная работа студентов (освоение теоретического материала, письменные домашние задания, подготовка к лабораторным работам, оформление лабораторных работ, подготовка к текущему и итоговому контролю).

При проведении лабораторных занятий запланирована активная работа в компьютерном классе, в обязательном порядке должен быть обеспечен доступ студентов в Интернет.

В рамках практической подготовки студентов профессиональные навыки формируются при выполнении расчетных работ, связанных с использованием различных приближений квантовой химии (МО ЛКАО, метод орбиталей Хюккеля, приближения Дебая-Хюккеля, теория функционала плотности) с применением математического аппарата квантовой механики и специализированного программного обеспечения (MORAS, Spartan, Gamess Firefly). Также практикуется выполнение работы по индивидуальному научному плану в рамках научной тематике кафедры, формирование понятийного аппарата, понимание принципов, законов и методологии квантовой химии происходит в рамках индивидуальных отчетов, разборов конкретных ситуаций, анализе научных публикаций.

При обучении студентов с *ограниченными возможностями здоровья и инвалидностью*

- обеспечение студентов электронными образовательными ресурсами;
- проведение текущей и итоговой аттестации с учетом состояния здоровья обучающегося, при необходимости – предоставление дополнительного времени для подготовки ответа;
- оказание помощи студенту в организации самостоятельной работы;

- проведение индивидуальных консультаций;
- при необходимости содействие обучению по индивидуальному учебному плану.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Самостоятельная работа студентов включает:

- освоение теоретического материала;
- подготовку к текущим устным опросам и проверочным контрольным заданиям;
- выполнение письменных домашних заданий;
- оформление лабораторной работы.

Самостоятельная работа студентов подкреплена учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, руководства и инструкции по работе с программным обеспечением.

Система текущего контроля самостоятельной работы студентов включает:

- отчет о выполнении лабораторных работ;
- устный групповой и индивидуальный отчеты;
- групповые обсуждения по отдельным разделам дисциплины;
- проверочные контрольные задания.

Перечень вопросов для экзамена

1. Квантовая механика и ее роль в развитии современной науки.
2. Корпускулярно-волновой дуализм, как физическая основа квантовой механики. Постоянная Планка.
3. Принцип суперпозиции состояний. Требования к физическим («наблюдаемым») величинам.
4. Математический аппарат квантовой механики: операторы физических величин, их свойства.
5. Операторное уравнение. Свойства собственных значений и собственных функции операторных уравнений.
6. Волновая функция (функции состояния) и ее свойства. Понятие вероятности в квантовой механике. Вероятность результатов измерений физических величин, средние значения наблюдаемых величин.
7. I постулат квантовой механики (о волновой функции).
8. Среднее значение оператора физической величины.
9. II постулат квантовой механики (о способе описания физических величин).
10. Принцип соответствия.
11. Уравнение Шредингера (временное). III постулат квантовой механики (Об основном уравнении квантовой механики).
12. Виды оператора Гамильтона.

13. Стационарные состояния в квантовой механике. Стационарное уравнение Шредингера.
14. Соотношение неопределенностей Гейзенберга.
15. Примеры решения уравнения Шредингера (модельные задачи). Одномерное движение свободной частицы. Движение частицы в одномерной потенциальной яме. Одномерный потенциальный барьер. Туннельный эффект. Линейный гармонический осциллятор.
16. Частица в центральном поле. Квантовомеханическое описание атома водорода и водородоподобных атомов.
17. Атомная орбиталь.
18. Свойства водородоподобного атома.
19. Спин электрона.
20. Многоэлектронные атомы.
21. Вариационный принцип в квантовой химии. Вариационный метод Ритца.
22. Теория возмущений Релея-Шредингера. Применение в квантовой химии.
23. Системы тождественных частиц. Одноэлектронное приближение.
24. Принцип Паули
25. Метод самосогласованного поля (ССП). Уравнения Хартри. Средняя энергия в одноэлектронном приближении.
26. Определитель Слэтера.
27. Электронные оболочки.
28. Метод Хартри-Фока. Кулоновские и обменные интегралы.
29. Теорема Купманса.
30. Корреляция электронов.
31. Свойства многоэлектронных атомов.
32. Теория химической связи. Основные приближения квантовой химии.
33. Приближение Борна-Оппенгеймера. Уравнение Шредингера для движения электронов в поле ядер.
34. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Хартри-Фока-Рутаана.
35. Приближенные атомные орбитали. Орбитали Слэтера. Орбитали гауссова типа.
36. Базисные наборы атомных орбиталей. Минимальные, валентно-расщепленные, улучшенные базисные наборы.
37. Неэмпирические (ab initio) квантовохимические методы расчета молекул.
38. Методы учета электронной корреляции - пост-хартрифоковские методы. Методы конфигурационных взаимодействий (КВ и МКВ) и теории возмущения Меллера-Плессе в квантовой химии.
39. Теория функционала плотности. Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шема.
40. Полуэмпирические квантовохимические методы. Нулевое дифференциальное перекрытие (НДП).

7. Данные для учета успеваемости студентов в БАРС

Таблица 1.1 Таблица максимальных баллов по видам учебной деятельности.

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Семестр	Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия	Самостоятельная работа	Автоматизированное тестирование	Другие виды учебной деятельности	Промежуточная аттестация	Итого
6	5	15	0	15	0	25	40	100

Программа оценивания учебной деятельности студента

6 семестр

Лекции – 0-5 баллов

0 баллов – студент посещает менее 60% лекции, не участвует в обсуждении проблемных задач, демонстрирует безразличие к задаваемым вопросам.

1 баллов – студент посещает более 60% лекции, не участвует в обсуждении проблемных задач, демонстрирует безразличие к задаваемым вопросам.

2 баллов – студент посещает более 70% лекции, редко участвует в обсуждении проблемных задач, делает попытки находить ответы на задаваемые вопросы.

3 баллов – студент посещает более 80% лекции, принимает участие в обсуждении проблемных задач, иногда дает правильные ответы к задаваемым вопросам.

4 баллов – студент посещает более 90% лекции, почти на каждой лекции участвует в обсуждении проблемных задач, предлагает их решение, в большинстве случаев дает правильный ответ на задаваемые вопросы.

5 баллов – студент посещает все лекции, активно участвует в обсуждении проблемных задач, предлагает нестандартные решения, практически всегда дает правильные ответы на поставленные лектором вопросы.

Лабораторные занятия – 0-15 баллов

0-5 баллов – лабораторная работа сдана значительно позже даты выполнения, значительные ошибки в оформлении и выполнении, которые не были исправлены в короткий срок.

6-10 баллов – лабораторная работа сдана позже даты выполнения, есть незначительные ошибки в оформлении, которые самостоятельно исправлены.

11-15 баллов – лабораторная работа сдана в день ее выполнения, оформлена грамотно и самостоятельно, практически без ошибок.

Практические занятия

Не предусмотрены

Самостоятельная работа – 0-15 баллов

0-4 баллов – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены со значительными ошибками, не полностью. Работа сдана не в срок.

5-9 баллов – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены с незначительными ошибками, полностью. Работа сдана в срок.

10-15 баллов – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены практически без ошибок, полностью. Работа сдана в срок.

Автоматизированное тестирование

Не предусмотрено

Другие виды учебной – 0-25 баллов

- оценивается подготовка к текущим устным опросам и проверочным контрольным заданиям

0-4 баллов – вопросы не раскрыты, проблемы с представлением;

5-14 баллов – вопросы раскрыты со значительными ошибками, представлены с ошибками;

15-25 баллов – вопросы раскрыты полностью, хорошо представлены.

Промежуточная аттестация – экзамен – 0-40 баллов

Промежуточная аттестация (экзамен) проходит по всем темам и разделам дисциплины.

При проведении промежуточной аттестации применяется следующее ранжирование:

ответ на «отлично» оценивается от 35 до 40 баллов;

ответ на «хорошо» оценивается от 30 до 34 баллов;

ответ на «удовлетворительно» оценивается от 23 до 29 баллов;

ответ на «неудовлетворительно» оценивается от 0 до 22 баллов.

Таким образом, максимально возможная сумма баллов за все виды учебной деятельности студента за 6 семестр по дисциплине «Квантовая химия» составляет 100 баллов.

Таблица 2.2 Таблица пересчета полученной студентом суммы баллов по дисциплине «**Квантовая химия**» в оценку (экзамен):

85-100 баллов	«отлично»
73-84 баллов	«хорошо»
56-72 баллов	«удовлетворительно»
0-55 баллов	«не удовлетворительно»

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Квантовая химия»

а) литература:

1. Церельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Москва: изд-во «Бином», 2010.

Книга представлена в ЭБС «БиблиоРоссика»

2. Бурмистрова Н.А., Пожаров М.В., Смотров М.П. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие. Саратов: изд-во Саратовского университета, 2020.

3. Барановский В.И. «Квантовая механика и квантовая химия». Москва, Издательский центр «Академия», 2008.

б) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

1. MicrosoftWindowsPro 7 (Номер лицензии: OpenLicense № 46312747 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07.) (70 шт.); MicrosoftWindowsVistaBusinessНомер лицензии: № 42226296, от 21.12.2009. (21 шт.);

2. MicrosoftOfficeStandard 2003 SP3 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07.) (2 шт.);

3. MicrosoftOfficeProfessional 2003 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07); Office 2007 Suites (№ ИОП 47/08 от 07.07.2008) (10 шт.).

4. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса- Стандартный Russian Edition. 1500-2499 Node 1 year Educational Renewal License № лицензии 0B00160530091836187178.

5. HyperChemRelease 8.0 Proffesional 2 шт. (Гос. контракт № ИОП 47/08, заключенного 7 июля 2008г; 4 шт.: Закупка 22 мая 2007 по контракту № 048K/07 на основании распоряжения № 46 от 06.07.07.).

6. ChemBio3DUltra 11.0 withMOPAC (№ CER5030661, № ИОП 47/08 от 07.07.2008).

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины «Квантовая химия»

- Лекционные аудитории;
- Компьютерный класс, оснащенный программным обеспечением: интернет – браузер, MicrosoftOffice, ChemOffice; HyperChem и с выходом в Интернет;
- Проектор мультимедия.

Место осуществления практической подготовки: учебные лаборатории Института химии

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия и профилям «Аналитическая химия и химическая экспертиза», «Физическая химия», «Химия низко- и высокомолекулярных органических веществ».

Автор

Профессор кафедры общей и неорганической химии

д.х.н. доц.

Бурмистрова Н.А

Программа одобрена на заседании кафедры общей и неорганической химии от 21 мая 2019 года, протокол №15.

Актуализация программы одобрена на заседании кафедры общей и неорганической химии от 17 марта 2021 года, протокол №11.

Актуализация программы одобрена на заседании кафедры общей и неорганической химии от «27» сентября 2021 года, протокол № 2.