

АННОТАЦИЯ

рабочей программы учебной дисциплины Б1.О.11 «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 Дисциплина «Квантовая химия» относится к обязательной части основной профессиональной образовательной программы бакалавриата по направлению подготовки 04.03.01. «Химия (уровень бакалавриата)», изучается в 4-ом семестре.</p> | | | | | | | | | | | |
| 3. | <p>Результаты освоения дисциплины «Квантовая химия»</p> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="text-align: left;">Код и наименование компетенций</th> <th style="text-align: left;">Индикаторы</th> <th style="text-align: left;">Дескрипторы</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td colspan="3" style="text-align: center;">Универсальные компетенции (УК)</td> </tr> <tr> <td style="vertical-align: top;"> <p>УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач</p> </td> <td style="vertical-align: top;"> <p>УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие.</p> <p>УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи.</p> <p>УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов.</p> <p>УК-1.4. При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения.</p> <p>УК-1.5 Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки.</p> </td> <td style="vertical-align: top;"> <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, ее 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; - синтезировать информацию, </td> </tr> </tbody> </table> | | | Код и наименование компетенций | Индикаторы | Дескрипторы | Универсальные компетенции (УК) | | | <p>УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач</p> | <p>УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие.</p> <p>УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи.</p> <p>УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов.</p> <p>УК-1.4. При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения.</p> <p>УК-1.5 Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки.</p> | <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, ее 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; - синтезировать информацию, |
| Код и наименование компетенций | Индикаторы | Дескрипторы | | | | | | | | | | |
| Универсальные компетенции (УК) | | | | | | | | | | | | |
| <p>УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач</p> | <p>УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие.</p> <p>УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи.</p> <p>УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов.</p> <p>УК-1.4. При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения.</p> <p>УК-1.5 Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки.</p> | <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, ее 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; - синтезировать информацию, | | | | | | | | | | |

| | | |
|---|--|--|
| | | <p>источниках; -</p> <ul style="list-style-type: none"> - 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). |
| Общепрофессиональные компетенции (ОПК) | | |
| <p>ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники</p> | <p>ОПК-3.1. Знает основные методы, способы и средства получения, хранения, обработки результатов научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий</p> | <p>Знать: современные представления о строении и структуре вещества, теоретические основы расчета и методы экспериментального определения физико-химических характеристик исследуемых соединений в зависимости от их строения и структуры.</p> <p>Уметь: применять теоретические и полу-эмпирические модели и (или) методы при решении задач профессиональной деятельности;</p> <ul style="list-style-type: none"> - использовать современное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении конкретных физико-химических задач. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - навыками использования стандартного программного обеспечения для решения профессиональных задач (в том числе, для обработки экспериментальных результатов, математического моделирования процессов и объектов на базе стандартных пакетов, прикладных программных комплексов и т.д.). |
| | <p>ОПК-3.2 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности;</p> | |
| | <p>ОПК-3.3. Умеет получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий;</p> | |
| | <p>ОПК-3.4. Владеет методами регистрации и программным обеспечением для обработки результатов научного эксперимента.</p> | |
| Профессиональные компетенции (ПК) | | |
| <p>ПК-1 Способен проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты.</p> | <p>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> | <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 опера- |

| | | | |
|--|--|---|--|
| | | <p>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;</p> <p>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.</p> | <p>ционных систем.</p> <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> <ul style="list-style-type: none"> 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. |
|--|--|---|--|

4. Структура и содержание дисциплины

4.1. Структура дисциплины

| Вид учебной работы | Всего часов | 4 семестр |
|----------------------------------|-------------|-----------|
| Общая трудоемкость дисциплины | 144 | 144 |
| Аудиторные занятия | 84 | 84 |
| Лекции | 34 | 34 |
| Лабораторные занятия | 50 | 50 |
| Самостоятельная работа студентов | 33 | 33 |
| Контроль | 27 | 27 |

4.2. Содержание дисциплины

Предмет квантовой механики. Основные этапы развития квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики. Операторы, их свойства. Эрмитовы операторы, их собственные значения и собственные функции. Вырождение.

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.

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.

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.

Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Атомные орбитали, их радиальные и угловые компоненты. Квантовые числа, их физический смысл. Теория момента импульса.

| | |
|-----------|---|
| | <p>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. LS-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. o- 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 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-80abucj iibhv9a. 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.