

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Баламирзоев Назим Лиодинович
Должность: И.о. ректора
Дата подписания: 03.10.2023 10:48:42
Уникальный программный ключ:
2a04bb882d7edb7f479cb266eb4aaaaedebee849

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

высшего образования

«Дагестанский государственный технический университет»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Квантово-химические расчеты в теоретической химии»

наименование дисциплины по ОПОП

для направления 18.03.01 – «Химическая технология»

код и полное наименование направления

по профилю «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов»

факультет Технологический

наименование факультета, где ведется дисциплина

кафедра Химии


наименование кафедры, за которой закреплена дисциплина

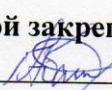
Форма обучения очная, заочная, курс 4 семестр (ы) 7.

очная, очно-заочная, заочная

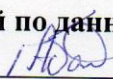
Махачкала, 2021 г.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 18.03.01 – «Химическая технология» с учетом рекомендаций и ОПОП ВО по профилю подготовки «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов».

Разработчик  Сулейманов С.И., к.х.н., ст. преподаватель
подпись (ФИО уч. степень, уч. звание)
« 18 » сентября 20 21 г.

Зав. кафедрой, за которой закреплена дисциплина
 Абакаров Г.М., д.х.н., профессор
подпись (ФИО уч. степень, уч. звание)
« 18 » сентября 20 21 г.

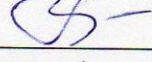
Программа одобрена на заседании выпускающей кафедры Химии от 20.09.2021 года, протокол № 1.

Зав. выпускающей кафедрой по данному направлению
 Абакаров Г.М., д.х.н., профессор
подпись (ФИО уч. степень, уч. звание)
« 20 » сентября 20 21 г.

Программа одобрена на заседании Методического совета факультета 18.03.01 – «Химические технологии» факультета Технологии от 21.09.2021 года, протокол № 1.

Председатель Методического совета факультета
 Ибрагимова Л.Р., к.т.н., доцент
подпись (ФИО уч. степень, уч. звание)
« 23 » сентября 20 21 г.

Декан факультета  Абдулхаликов З.А.
подпись ФИО

Начальник УО  Магомаева Э.В.
подпись ФИО

И. о. проректора по УР  Баламирзоев Н.Л.
подпись ФИО

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Квантово-химические расчеты в теоретической химии» являются:

- формирование на основе квантовой механики теоретических представлений о закономерностях электронного строения атомов и молекул и выработать навыки интерпретации химических и физико-химических свойств атомов и молекул, исходя из их электронного строения;
- освоение вопросов моделирования и оптимизации сложных химико-технологических процессов, которые в свою очередь формируют профессиональный уровень бакалавра по данному направлению;
- освоение методов обработки и интерпретации результатов лабораторных исследований и реальных процессов нефтеперерабатывающей, нефтехимической и газовой промышленности;
- получение студентами навыков корректной постановки задач химической технологии и их решение с помощью современных персональных компьютеров, реализации расчётных алгоритмов и интерпретации полученных результатов;
- освоение методов планирования и количественной обработки результатов физико-химического и технологического эксперимента;
- исследование химико-технологических процессов методами математического моделирования с применением вычислительной техники и их оптимизации, основами математического моделирования технологических процессов.

Задачей изучения дисциплины является подготовка студентов к творческому применению полученных знаний при создании новых и совершенствованию действующих технологических процессов.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП

Учебный курс «Квантово-химические расчеты в теоретической химии» входит в вариативную часть ОПОП, формируемая участниками образовательных отношений. В дальнейшем, приобретенные навыки понадобятся студенту при освоении специальных дисциплин, при курсовом и дипломном проектировании, в практической профессиональной деятельности.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

В результате освоения дисциплины «Квантово-химические расчеты в теоретической химии» студент должен овладеть следующими компетенциями: ОПК-1; ОПК-5.

Код компетенции	Наименование компетенции	Наименование показателя оценивания (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)
ОПК-1	Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на	Знает основные постулаты и уравнения квантовой химии, способы их применения для решения теоретических задач, роль квантовой химии как

	<p>знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов.</p>	<p>теоретического фундамента современной химии и процессов химической технологии.</p> <p>Умеет использовать уравнения квантовой химии и справочные данные для решения профессиональных задач теоретической химии.</p> <p>Владеет теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в таблице Менделеева.</p>
ОПК-5	<p>Способен осуществлять экспериментальные исследования и испытания по заданной методике, проводить наблюдения и измерения с учетом требований техники безопасности, обрабатывать и интерпретировать экспериментальные данные.</p>	<p>Знает квантово-химические основы спектральных методов анализа – УФ-, ИК- и КР-спектроскопии.</p> <p>Умеет интерпретировать экспериментальные данные химии (свойства атомов, молекул, закономерности химических процессов) на основе положений и закономерностей квантовой механики и квантовой химии.</p> <p>Владеет полуэмпирическими методами расчета электронной структуры молекул и справочной литературой по тематике строения молекул.</p>

4. Объем и содержание дисциплины

Форма обучения	очная	очно-заочная	заочная
Общая трудоемкость по дисциплине (ЗЕТ/ в часах)	3/108	–	3/108
Семестр	7	–	7
Лекции, час	34	–	9
Практические занятия, час	17	–	4

Лабораторные занятия, час	17	–	4
Самостоятельная работа, час	40	–	87
Курсовой проект (работа), РГР, семестр	–	–	–
Зачет, час	Зачёт	–	Зачет, 4 часа
Часы на экзамен, час	–	–	–

4.1. Содержание дисциплины (модуля)

№ п/п	Раздел дисциплины, тема лекции и вопросы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)												
			Очная форма				Очно-заочная форма				Заочная форма				
			ЛК	ПЗ	ЛБ	СР	ЛК	ПЗ	ЛБ	СР	ЛК	ПЗ	ЛБ	СР	
1	<p>Тема лекции «Основы квантовой механики».</p> <p>1. Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции развития квантовой химии как основного теоретического инструмента современной химической науки. Перспективы развития квантовой химии и ее применение для решения прикладных задач.</p> <p>2. Понятие оператора. Действия с операторами. Линейность и эрмитовость операторов.</p> <p>3. Собственные значения и собственные функции операторов.</p> <p>4. Теоремы о свойствах собственных функций и собственных значениях операторов.</p>	7	2			2	–	–	–	–	2				5

2	<p>Тема лекции «Операторы, основные понятия и определения».</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Понятие динамической переменной. 2. Динамические переменных в макромире и микромире. 3. Операторы динамических переменных и принцип соответствия (координаты, проекции импульса, импульса, кинетической энергии, момента импульса, квадрата момента импульса, функции Гамильтона. 4. Описание состояния материальных объектов в микромире и макромире. 5. Основные законы квантовой механики. 6. Специфичность законов квантовой механики. Принцип тождественности частиц и его специфичность. 7. Реализация принципа тождественности частиц и свойства волной функции системы. 	7	2	2	4	2	-	-	-	-	2			5
3	<p>Тема лекции «Свойства волновой функции».</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Свойства волновой функции. 2. Статистический смысл волновой функции. 3. Плотность вероятности нахождения частиц в отдельных точках пространства. 4. Соотношение неопределенностей Гейзенберга. 	7	2			2	-	-	-	-	2			5

4	<p>Тема лекции «Решение уравнений на собственные значения».</p> <p>1. Решение уравнений на собственные значения для операторов P_x, P. Анализ решений.</p> <p>2. Сопоставление характера изменений рассмотренных динамических переменных в микромире и макромире.</p> <p>3. Решение уравнений на собственные значения для операторов M, M^2. Анализ решений.</p> <p>4. Сопоставление характера изменений рассмотренных динамических переменных в микромире и макромире.</p>	7	2	2	4	2	-	-	-	-			2	5
5	<p>Тема лекции «Стационарные системы в микромире».</p> <p>1. Понятия о стационарных потенциальных полях, состояниях и системах. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.</p> <p>2. Определение свободной частицы. Решение уравнения Шредингера для свободной частицы. Анализ решений.</p> <p>3. Определение частицы в потенциальном «ящике». Решение уравнение Шредингера для частицы в потенциальном «ящике». Анализ решений.</p>	7	2			2	-	-	-	-	2			5

6	<p>Тема лекции «Решение уравнения Шредингера для частицы в потенциальном барьере».</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Определение одномерного потенциального барьера. 2. Решение уравнения Шредингера для частицы в потенциальном барьере. Анализ решений. Туннельный эффект. 3. Определение линейного гармонического осциллятора. 4. Решение уравнения Шредингера для линейного гармонического осциллятора. Анализ решений. 	7	2	2	4	2	–	–	–	–		2	5
7	<p>Тема лекции «Решение уравнения Шредингера для квантового ротатора».</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Определение квантового ротатора. 2. Решение уравнения Шредингера для квантового ротатора. Анализ решений. 3. Определение центрального потенциального поля. 4. Решение уравнения Шредингера для частицы в центральном поле. Анализ решения. 	7	2			2	–	–	–	–		2	5
8	<p>Тема лекции «Квантово-механическое описание атомных систем».</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Решение уравнения Шредингера для атома водорода и водородоподобных ионов. Анализ решений. 2. водородоподобные атомные орбитали, их радиальные и угловые компоненты, энергетический спектр атома водорода. 3. Атомные орбитали Слейтера-Зенера. 	7	2	2		2	–	–	–	–		2	5

9	<p>Тема лекции «Приближенные методы решения уравнения Шредингера».</p> <ol style="list-style-type: none"> Особенности квантово-механического описания многоэлектронных атомов (учет межэлектронного отталкивания). Приближенные методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронного атома. Метод Хартри (одноэлектронное приближение, учет межэлектронного отталкивания). 	7	2			2	–	–	–	–			5
10	<p>Тема лекции «Метод Хартри-Фока».</p> <ol style="list-style-type: none"> Соответствие метода Хартри принципу тождественности частиц. Представление полной волновой функции, обеспечивающее выполнение принципа тождественности частиц. Метод Хартри-Фока. Последовательность одноэлектронных энергетических состояний в атоме. Теорема Купманса. Связь окислительно-восстановительных свойств атомов с их энергетическими характеристиками. 	7	2	2		2	–	–	–	–	1		5

11	<p>Тема лекции «Квантово-механическое описание молекулярных систем».</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Уравнение Шредингера для молекулярных систем. 2. Адиабатическое приближение (разделение электронного и ядерного движений). 3. Основные положения метода молекулярных орбиталей. 4. Формализм метода молекулярных орбиталей. 5. Проблемы реализации самосогласованного поля в методе молекулярных орбиталей. 	7	2	4	2	-	-	-	-				5
12	<p>Тема лекции «Приближение Рутана».</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Приближение Рутана (линейной комбинации атомных орбиталей). 2. Система уравнений Рутана. Достоинства и недостатки метода молекулярных орбиталей. 3. Принципы классификации одноэлектронных молекулярных орбиталей. 4. Последовательность одноэлектронных энергетических состояний в молекуле. 5. Корреляционные диаграммы двухатомных гомоатомных молекул. 6. Корреляционные диаграммы двухатомных гетероатомных молекул. 	7	2	2	2	-	-	-	-				5

13	<p>Тема лекции «Полуэмпирические методы расчета электронной структуры молекул».</p> <p>1. Основные принципы построения полуэмпирических методов расчета электронной структуры молекул.</p> <p>2. Допущения метода Хюккеля. Достоинства и недостатки метода Хюккеля.</p> <p>3. Допущения расширенного метода Хюккеля (метод Гофмана).</p> <p>4. Достоинства и недостатки расширенного метода Хюккеля.</p>	7	2		2	-	-	-	-				5
14	<p>Тема лекции «Неэмпирические методы расчета».</p> <p>1. Приближение NDO. Полуэмпирические методы, использующие приближение NDO.</p> <p>2. Понятие о неэмпирических методах расчета электронной структуры молекул.</p> <p>3. Результаты расчетов электронной структуры молекул полуэмпирическими методами и их связь физико-химическими и химическими свойствами молекулярных систем.</p>	7	2	2	2	-	-	-	-				5

15	<p>Тема лекции «Группы симметрии».</p> <p>1. Молекулярные аспекты симметрии. Элементы симметрии, операции симметрии молекул. Некоторые сведения из теории групп.</p> <p>2. Точечные группы симметрии. Таблицы умножения точечной группы симметрии.</p> <p>3. Представление группы. Характер. Приводимые и неприводимые представления.</p> <p>4. Свойства неприводимых представлений. Разложение приводимого представления на неприводимые.</p> <p>5. Представление группы C_{3v} в базисе s- и p-орбиталей. Таблицы характеров.</p> <p>6. Понятие прямого произведения представлений.</p>	7	2			4	-	-	-	-				5
----	--	---	---	--	--	---	---	---	---	---	--	--	--	---

17	Тема лекции «Квантово-химическое описание элементарного акта химической реакции».													
	1. Путь реакции и координата реакции на поверхности потенциальной энергии. Гессиян. 2. Стационарные точки на ППЭ. 3. Переходный вектор. Интермедиаты, переходные состояния. 4. Симметрия реагентов, переходного состояния и продуктов реакции. Оптимизация геометрии. 5. Качественный анализ возможных механизмов химических реакций. 6. Теория граничных орбиталей Фукуи. Нуклеофильные и электрофильные реакции. 7. Вальденовское обращение.	7	2	1	1	4	–	–	–	–			7	
Итого			34	17	17	40	–	–	–	–	9	4	4	87

4.2.1. Содержание лабораторных занятий

№ п/п	№ лекции из рабочей программы	Наименование лабораторного занятия	Количество часов			Рекомендуемая литература и методические разработки (№ источника из списка литературы)
			Очно	Очно-заочная	Заочная	
1	2	3	4	5	6	7
1	1, 2	«Действия с операторами», «Свойства операторов»	4	–		[1, 2]
2	3, 4	«Собственные значения и собственные	4	–	2	[2, 4]

		функции операторов»				
3	5, 6	«Расчет атомных состояний»	4	–		[2]
4	7-11	«Расчет двухатомных молекул»	4	–	2	[1]
5	12-17	«Расчет многоатомных молекул»	1	–		[3]
ИТОГО			17	–	4	

4.2.2. Содержание практических занятий

№ п/п	№ лекции из рабочей программы	Наименование практического занятия	Количество часов			Рекомендуемая литература и методические разработки (№ источника из списка литературы)
			Очно	Очно- заочная	Заочная	
1	2	3	4	5	6	7
1	1, 2	«Действия с операторами», «Свойства операторов»	2	–	2	[2, 4]
2	3, 4	«Собственные значения и собственные функции операторов»	2	–		[2, 4]
3	5, 6	«Расчет атомных состояний»	2	–	2	[2]
4	7, 8	«Расчет двухатомных молекул»	2	–		[1]
5	9, 10	«Расчет многоатомных молекул»	2	–		[3]
6	11, 12	«Расчет многоатомных молекул в приближении Рутана»	2	–		[2, 4]
7	13, 14	«Расчет молекул и радикалов полуэмпирическими методами»	2	–		[2, 4]
8	15, 16	«Расчет молекул с использованием группы симметрии»	2	–		[2, 4]
9	17	«Путь реакции и координата реакции на поверхности потенциальной энергии. Гессиан»	1	–		[2, 4]
ИТОГО			17	–	4	

4.3. Тематика для самостоятельной работы студента

№ п/п	Тематика по содержанию дисциплины, выделенная для самостоятельного изучения	Количество часов из содержания дисциплины			Рекомендуемая литература и источники информации	Формы контроля СРС
		Очно	Очно- заочная	Заочная		
1	2	3	4	5	6	7
1	Теоремы о свойствах собственных функциях и собственных значениях операторов	2	–	5	[1, 9]	КР
2	Реализация принципа тождественности частиц и свойства волной функции системы	2	–	5	[3, 6]	КР
3	Методы проверки адекватности модели и объекта и ее коррекция	2	–	5	[3]	КР
4	Сопоставление характера изменений рассмотренных динамических переменных в микромире и макромире	2	–	5	[3, 6]	КР
5	Определение частицы в потенциальном «ящике». Решение уравнения Шредингера для частицы в «потенциальном ящике. Анализ решений	2	–	5	[3, 6]	КР
6	Решение уравнения Шредингера для линейного гармонического осциллятора. Анализ решений	2	–	5	[3, 6]	КР
7	Решение уравнения Шредингера для частицы в центральном поле. Анализ решения	2	–	5	[3, 6]	КР
8	Атомные орбитали Слейтера-Зенера	2	–	5	[3, 6]	КР
9	Метод Хартри (одноэлектронное приближение, учет межэлектронного отталкивания)	2	–	5	[3, 6]	КР
10	Связь окислительно-	2	–	5	[3, 6]	КР

	восстановительных свойств атомов с их энергетическими характеристиками					
11	Проблемы реализации самосогласованного поля в методе молекулярных орбиталей	2	–	5	[3, 6]	КР
12	Корреляционные диаграммы двухатомных гетероатомных молекул	2	–	5	[3, 6]	КР
13	Достоинства и недостатки расширенного метода Хюккеля	2	–	5	[3, 6]	КР
14	Результаты расчетов электронной структуры молекул полуэмпирическими методами и их связь с физико-химическими и химическими свойствами молекулярных систем	2	–	5	[3, 6]	КР
15	Понятие прямого произведения представлений	4	–	5	[3, 6]	КР
16	Нормальные колебания и классификация нормальных колебаний молекулы воды	4	–	5	[3, 6]	КР
17	Вальденовское обращение	4	–	7	[3, 6]	КР
ИТОГО		40	–	87		Зачет

5. Образовательные технологии

Основными видами обучения студентов являются лекции и лабораторные занятия в дисплейном классе и самостоятельная работа студентов.

При чтении лекций особое внимание следует уделить отбору материала, логике его следования в рамках дисциплины, формированию понятийного аппарата. В процессе работы преподавателю следует широко использовать мультимедийную технику, демонстрировать не только статичные иллюстрационные материалы, но и вносить в учебный процесс элементы непосредственно компьютерного моделирования, обсуждая с аудиторией его ход и результаты.

Практикум ориентируется на формирование у студентов устойчивых навыков работы с программным обеспечением общего назначения и средствами разработки программ под контролем преподавателя. Необходимо, чтобы студенты самостоятельно реализовывали на компьютерах выданные преподавателем задания, учились самостоятельно принимать различные организационные решения, в том числе по организации данных и хранению информации на компьютерах. Важно, чтобы результаты каждой лабораторной работы оформлялись в соответствии с установленными требованиями и сохранялись студентами до завершения всего курса.

Самостоятельная работа студента ориентирована на работу дома, в библиотеке, в классах компьютерной вычислительной лаборатории факультета. Студенты должны систематически работать с учебной литературой, конспектами лекций, с материалами из интернета. Оценка самостоятельной работы студента должна быть составной частью итоговой оценки знаний студента по данной дисциплине.

Удельный вес занятий проводимых в интерактивной форме составляет не менее 20 % аудиторных занятий (14 часов).

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

Перечень вопросов для входной контрольной работы

1. Экспериментальные основы квантовой механики.
2. Атом водорода, вид волновой функции.
3. Представление операторов матрицами.
4. Гармонический осциллятор.
5. Постулаты Бора.
6. Дифференциальные уравнения.
7. Уравнение Планка.
8. Закон Вина.
9. Операторы, собственные функции и собственные значения.
10. Оператор Гамильтона.

Перечень вопросов для 1-ой текущей аттестационной контрольной работы

1. Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции в развитии квантовой химии. Современные возможности и применение при решении химических задач.
2. Экспериментальные основы квантовой механики. Квантовые свойства микрочастиц, опыты, демонстрирующие эти свойства.
3. Основные положения квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики. Основные постулаты квантовой механики.
4. Волновая функция, ее физический смысл, основные свойства. Операторы, собственные функции и собственные значения.
5. Представление операторов матрицами.
6. Соотношение неопределенностей. Операторы координат, импульсов, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона.
7. Принцип суперпозиции состояний. Вероятностная трактовка квантовой механики. Полная ортонормированная система волновых функций.
8. Стационарное уравнение Шредингера, его аналогия с уравнениями классической механики. Зависящее от времени уравнение Шредингера.
9. Принцип Паули. Принцип тождественности микрочастиц. Симметричные и антисимметричные волновые функции. Фермионы и бозоны.
10. Решение уравнения Шредингера для задачи о движении свободной частицы и задачи о движении частицы в потенциальном ящике.

Перечень вопросов для 2-ой текущей аттестационной контрольной работы

1. Гармонический осциллятор. Уравнение Шредингера гармонического осциллятора. Волновые функции и спектр энергий, их особенности.

2. Квантово-механическая задача о жестком ротаторе. Волновая функция и энергия жесткого ротатора. Сферические гармоники, угловая зависимость волновых функций.

3. Атом водорода, вид волновой функции. Физический смысл квантовых чисел. Зависимость радиальной составляющей волновой функции от расстояния между ядром и электроном при различных квантовых числах. Атомная система единиц.

4. Угловые моменты в многоэлектронных атомах (орбитальный, спиновый, полный). Атомные термы в нулевом и первом приближении схемы Рассела-Саундерса. Правила Гунда. Приближение jj -связи.

5. Многоэлектронные системы. Одноэлектронное приближение. Приближение самосогласованного поля (ССП). Вариационный принцип.

6. Математическая формулировка одноэлектронного приближения. Метод СП Хартри-Фока. Ограниченный и неограниченный метод СП ХФР, операторы Фока, кулоновский, обменный, их собственные значения.

7. Молекулярное уравнение Шредингера. Приближение Борна-Оппенгеймера и адиабатическое приближение. Понятие о вибронных взаимодействиях. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана. Теорема Купманса.

8. Физические эффекты, приводящие к образованию химической связи. Делокализация электронной плотности. Образование ковалентной связи. Образование ионной связи.

9. Гомоядерные двухатомные молекулы, вычисление энергии их МО методом МО СП. Секулярное уравнение. Связывающие и разрыхляющие орбитали.

10. Молекулярные термы. Концепции гибридизации и резонанса в терминах квантовой механики. Качественная теория МО. Корреляционные орбитальные диаграммы.

Перечень вопросов для 3-й текущей аттестационной контрольной работы

1. Оценка электронных свойств молекулы. Потенциалы ионизации. Мультипольные моменты. Заряды атомов. Различные шкалы атомных зарядов. Оценка порядков связи и валентности атомов. Понятие об индексах реакционной способности.

2. Концепция ППЭ. Оценка физико-химических свойств вещества и реакционной способности на основе изучения ППЭ. Стационарные точки, локальные минимумы и переходные состояния.

3. Оптимизация геометрии, поиск переходных состояний. Определение термодинамических параметров реакций и констант скорости на основе исследования ППЭ.

4. Симметрия молекулярных систем. Основные понятия теории групп. Группы симметрии молекул. Неприводимые представления. Характеры НП.

5. Использование теории групп в квантовой химии. Классификация МО и молекулярных термов. Сокращение размерности гамильтониана. Оценка молекулярных интегралов.

6. Неэмпирические (*ab initio*) методы в квантовой химии. Преимущества и недостатки неэмпирических методов. Электронная корреляция.

7. Методы учета электронной корреляции. Методы конфигурационного взаимодействия. Теория возмущений. Теория связанных кластеров. Их сравнительная характеристика, области применения.

8. Теория функционала плотности. Ее теоретические основы, область применения, возможности и ограничения.

9. Полуэмпирические методы. Приближения валентных электронов, нулевого дифференциального перекрывания, расчет одно- и двухэлектронных интегралов.

Приближение нулевого двухатомного дифференциального перекрывания. Методы MNDO, AM1 и PM3.

10. Проблема выбора базиса АО. Основные базисные наборы АО: минимальный, двух- и трехэкспоненциальные, корреляционно-согласованные. Поляризация функции. Диффузные функции. Их особенности и применение для описания различных химических систем.

Вопросы для проверки остаточных знаний

1. Экспериментальные основы квантовой механики. Квантовые свойства микрочастиц, опыты, демонстрирующие эти свойства.

2. Основные положения квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики. Основные постулаты квантовой механики.

3. Волновая функция, ее физический смысл, основные свойства. Операторы, собственные функции и собственные значения. Представление операторов матрицами.

4. Соотношение неопределенностей. Операторы координат, импульсов, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона.

5. Принцип суперпозиции состояний. Вероятностная трактовка квантовой механики. Полная ортонормированная система волновых функций.

6. Стационарное уравнение Шредингера, его аналогия с уравнениями классической механики. Зависящее от времени уравнение Шредингера.

7. Принцип Паули. Принцип тождественности микрочастиц. Симметричные и антисимметричные волновые функции.

Вопросы к зачету

1. Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции в развитии квантовой химии. Современные возможности и применение при решении химических задач.

2. Экспериментальные основы квантовой механики. Квантовые свойства микрочастиц, опыты, демонстрирующие эти свойства.

3. Основные положения квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики. Основные постулаты квантовой механики.

4. Волновая функция, ее физический смысл, основные свойства. Операторы, собственные функции и собственные значения. Представление операторов матрицами.

5. Соотношение неопределенностей. Операторы координат, импульсов, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона.

6. Принцип суперпозиции состояний. Вероятностная трактовка квантовой механики. Полная ортонормированная система волновых функций.

7. Стационарное уравнение Шредингера, его аналогия с уравнениями классической механики. Зависящее от времени уравнение Шредингера.

8. Принцип Паули. Принцип тождественности микрочастиц. Симметричные и антисимметричные волновые функции. Фермионы и бозоны.

9. Решение уравнения Шредингера для задачи о движении свободной частицы и задачи о движении частицы в потенциальном ящике.

10. Гармонический осциллятор. Уравнение Шредингера гармонического осциллятора. Волновые функции и спектр энергий, их особенности.

11. Квантово-механическая задача о жестком ротаторе. Волновая функция и энергия жесткого ротатора. Сферические гармоники, угловая зависимость волновых функций.

12. Атом водорода, вид волновой функции. Физический смысл квантовых чисел. Зависимость радиальной составляющей волновой функции от расстояния между ядром и электроном при различных квантовых числах. Атомная система единиц.
13. Угловые моменты в многоэлектронных атомах (орбитальный, спиновый, полный). Атомные термы в нулевом и первом приближении, схемы Рассела-Саундерса. Правила Гунда. Приближение jj -связи.
14. Многоэлектронные системы. Одноэлектронное приближение. Приближение самосогласованного поля (ССП). Вариационный принцип.
15. Математическая формулировка одноэлектронного приближения. Метод СП Хартри-Фока. Ограниченный и неограниченный метод СП ХФР. Операторы Фока, кулоновский, обменный, их собственные значения.
16. Молекулярное уравнение Шредингера. Приближение Борна-Оппенгеймера и адиабатическое приближение. Понятие о вибронных взаимодействиях. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана. Теорема Купманса.
17. Физические эффекты, приводящие к образованию химической связи. Делокализация электронной плотности. Образование ковалентной связи. Образование ионной связи.
18. Гомоядерные двухатомные молекулы, вычисление энергии их МО методом МО СП. Секулярное уравнение. Связывающие и разрыхляющие орбитали.
19. Молекулярные термы. Концепции гибридизации и резонанса в терминах квантовой механики. Качественная теория МО. Корреляционные орбитальные диаграммы.
20. Оценка электронных свойств молекулы. Потенциалы ионизации. Мультипольные моменты. Заряды атомов. Различные шкалы атомных зарядов. Оценка порядков связи и валентности атомов. Понятие об индексах реакционной способности.
21. Концепция ГППЭ. Оценка физико-химических свойств вещества и реакционной способности на основе изучения ППЭ. Стационарные точки, локальные минимумы и переходные состояния.
22. Оптимизация геометрии, поиск переходных состояний. Определение термодинамических параметров реакций и констант скорости на основе исследования ППЭ.
23. Симметрия молекулярных систем. Основные понятия теории групп. Группы симметрии молекул. Неприводимые представления. Характеры НП.
24. Использование теории групп в квантовой химии. Классификация МО и молекулярных термов. Сокращение размерности гамильтониана. Оценка молекулярных интегралов.
25. Неэмпирические (*ab initio*) методы в квантовой химии. Преимущества и недостатки неэмпирических методов. Электронная корреляция.
26. Методы учета электронной корреляции. Методы конфигурационного взаимодействия. Теория возмущений. Теория связанных кластеров. Их сравнительная характеристика, области применения.
27. Теория функционала плотности. Ее теоретические основы, область применения, возможности и ограничения.
28. Полуэмпирические методы. Приближения валентных электронов, нулевого дифференциального перекрывания, расчет одно- и двухэлектронных интегралов. Приближение нулевого двухатомного дифференциального перекрывания. Методы MNDO, AM1 и PM3.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Рекомендуемая литература и источники информации (основная и дополнительная)

№ п/п	Виды занятий	Необходимая учебная, учебно-методическая (основная и дополнительная) литература, программное обеспечение, электронно-библиотечные и интернет ресурсы	Автор(ы)	Издательство и год издания	Количество изданий	
					В библиотеке	На кафедре
1	2	3	4	5	6	7
I. ОСНОВНАЯ						
1	ЛБ, срс	Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие	Назмитдинов Р.Г.	– Дубна: Государственный университет «Дубна», 2021. – 123 с. – ISBN 978-5-89847-631-1. – Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. – URL: https://e.lanbook.com/book/1969		
2	ЛБ, срс	Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие	Барановский В.И.	– Санкт-Петербург: Лань, 2019. – 428 с. – ISBN 978-5-8114-3961-4. – Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. – URL: https://e.lanbook.com/book/1136		
3	ЛБ, срс	Квантовая химия. Химическая связь и теория молекул: учебное пособие	Игнатов С.К.	– Нижний Новгород: ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2016. – 136 с. –		

				Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. URL: https://e.lanbook.com/book/153007		
II. ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ						
4	ЛБ, срс	Квантово-химические расчеты в теоретической химии: курс лекций для студ. напр. подг. бакалавров «Химическая технология»	Пиняскин В.В.	– Махачкала: ИПЦ ДГТУ, 2019. – 80 с. (электронный вариант http://foliant.ru/catalog/dstu)	10	
5	ЛБ, срс	Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие	Бурмистрова Н.А.	– Саратов: СГУ, 2020. – 68 с. – ISBN 978-5-292-04636-3. Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. URL: https://e.lanbook.com/book/170586		
6	ЛБ, срс	Расчет переходных состояний методами квантовой химии: учебно-методическое пособие	Плехович С.Д.	– Нижний Новгород: ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2015. – 21 с. – Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. URL: https://e.lanbook.com/book/153436		
7	ЛБ, срс	Квантовая химия: учебное пособие	Крашенинин В.И.	– Кемерово: КемГУ, 2019. – 82 с. – ISBN 978-5-8353-2440-8. Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная		

				система. URL: https://e.lanbook.com/book/135217		
8	ЛБ, срс	Задачи по квантовой химии: учебно-методическое пособие	Игнатов С.К.	– Нижний Новгород: ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2015. – 28 с. – Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. URL: https://e.lanbook.com/book/153008		
9	ЛБ, срс	Квантовая механика для студентов технических вузов: учебное пособие	Трясучёв В.А.	– Томск: ТПУ, 2017. – 156 с. – ISBN 978-5-4387-0746-2. – Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. URL: https://e.lanbook.com/book/106765		
III. МЕТОДИЧЕСКИЕ РАЗРАБОТКИ						
10	ЛБ, срс	Методические указания «Полуэмпирические методы квантовой химии»	Пиняскин В.В., Шабанов О.М.	Махачкала: ДГУ, 2009. – 54 с.		20
IV. ЭЛЕКТРОННЫЕ ИЗДАНИЯ						
11	ЛБ, срс	Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие	Барановский В.И.	Санкт-Петербург: Лань, 2019. – 428 с.	ЭБС «Лань», URL: https://e.lanbook.com/book/113631	

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Компьютерный класс, локальная сеть с доступом в Интернет, проектор.

Специальные условия инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ)

Специальные условия обучения и направления работы с инвалидами и лицами с ОВЗ определены на основании:

– Федерального закона от 29.12.2012 № 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации»;

– Федерального закона от 24.11.1995 № 181-ФЗ «О социальной защите инвалидов в Российской Федерации»;

– приказа Минобрнауки России от 05.04.2017 № 301 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры»;

– методических рекомендаций по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса, утвержденных Минобрнауки России от 08.04.2014 № АК-44/05вн.

Под специальными условиями для получения образования обучающихся с ОВЗ понимаются условия обучения, воспитания и развития, включающие в себя использование при необходимости адаптированных образовательных программ и методов обучения и воспитания, специальных учебников, учебных пособий и дидактических материалов, специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования, предоставление услуг ассистента (помощника), оказывающего необходимую помощь, проведение групповых и индивидуальных коррекционных занятий, обеспечение доступа в здания ДГТУ и другие условия, без которых невозможно или затруднено освоение ОПОП обучающихся с ОВЗ.

Обучение в рамках учебной дисциплины обучающихся с ОВЗ осуществляется ДГТУ с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья таких обучающихся.

Обучение по учебной дисциплине обучающихся с ОВЗ может быть организовано как совместно с другими обучающимися, так и в отдельных группах.

В целях доступности обучения по дисциплине обеспечивается:

1) для лиц с ограниченными возможностями здоровья по зрению:

– наличие альтернативной версии официального сайта ДГТУ в сети «Интернет» для слабовидящих;

– весь необходимый для изучения материал, согласно учебному плану (в том числе, для обучающихся по индивидуальным учебным планам) предоставляется в электронном виде на диске.

– индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс;

– присутствие ассистента, оказывающего обучающемуся необходимую помощь;

– обеспечение возможности выпуска альтернативных форматов печатных материалов (крупный шрифт или аудиофайлы);

– обеспечение доступа обучающегося, являющегося слепым и использующего собаку-проводника, к зданию ДГТУ.

2) для лиц с ОВЗ по слуху:

– наличие микрофонов и звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования (аудиоколонки);

3) для лиц с ОВЗ, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата, материально-технические условия должны обеспечивать возможность беспрепятственного доступа обучающихся в учебные помещения, столовые, туалетные и другие помещения организации, а также пребывания в указанных помещениях (наличие пандусов, поручней, расширенных дверных проемов и других приспособлений).

Перед началом обучения могут проводиться консультативные занятия, позволяющие студентам с ОВЗ адаптироваться к учебному процессу.

В процессе ведения учебной дисциплины научно-педагогическим работникам рекомендуется использование социально-активных и рефлексивных методов обучения, технологий социокультурной реабилитации с целью оказания помощи обучающимся с ОВЗ в установлении полноценных межличностных отношений с другими обучающимися, создании комфортного психологического климата в учебной группе.

Особенности проведения текущей и промежуточной аттестации по дисциплине для обучающихся с ОВЗ устанавливаются с учетом индивидуальных психофизических особенностей (устно, письменно на бумаге, письменно на компьютере, в форме тестирования и др.). При необходимости предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на зачете или экзамене.

9. Лист изменений и дополнений к рабочей программе

Дополнения и изменения в рабочей программе на 2021/2022 учебный год нецелесообразно.

Рабочая программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры химии от _____ 202__ года, протокол № _____.

Заведующий кафедрой химии _____ Абакаров Г.М., д.х.н., профессор
(подпись, дата) (ФИО, уч. степень, уч. звание)

Согласовано:

Декан технологического факультета _____ Абдулхаликов З.А., к.т.н., доцент
(подпись, дата) (ФИО, уч. степень, уч. звание)

Председатель МС факультета _____ Ибрагимова Л.Р., к.т.н., доцент
(подпись, дата) (ФИО, уч. степень, уч. звание)