

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Худин Александр Николаевич

Должность: Ректор

Дата подписания: 26.01.2021 12:36:20

Уникальный программный ключ:

08303ad8de1c60b987361de7085acb509ac3da143f415362ffaf0ee37e73a29

## МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

"Курский государственный университет"

Кафедра химии

УТВЕРЖДЕНО

протокол заседания

Ученого совета от 24.04.2017 г., №10

### Рабочая программа дисциплины

#### Основы квантовой химии

Направление подготовки: 11.03.04 Электроника и микроэлектроника

Профиль подготовки: Технологии в микроэлектронике

Квалификация: бакалавр

Факультет физики, математики, информатики

Форма обучения: очная

Общая трудоемкость 3 ЗЕТ

Виды контроля в семестрах:

зачет(ы) с оценкой 7

#### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	7 (4.1)		Итого	
	Неделя			
Вид занятий	уп	рп	уп	рп
Лекции	16	16	16	16
Лабораторные	16	16	16	16
Практические	16	16	16	16
В том числе инт.	12	12	12	12
Итого ауд.	48	48	48	48
Контактная работа	48	48	48	48
Сам. работа	60	60	60	60
Итого	108	108	108	108

Рабочая программа дисциплины Основы квантовой химии / сост. кандидат физико-математических наук, доцент кафедры химии Коротковский Вадим Игоревич; Курск. гос. ун-т. - Курск, 2017. - с.

Рабочая программа составлена в соответствии со стандартом, утвержденным приказом Минобрнауки России от 12 марта 2015 г. № 218 "Об утверждении ФГОС ВО по направлению подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника (уровень бакалавриата)" (Зарегистрировано в Минюсте России 07 апреля 2015 г. № 36765)

Рабочая программа дисциплины "Основы квантовой химии" предназначена для методического обеспечения дисциплины основной профессиональной образовательной программы по направлению подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника профиль Технологии в наноэлектронике

Составитель(и):

кандидат физико-математических наук, доцент кафедры химии Коротковский Вадим Игоревич

© Курский государственный университет, 2017

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

1.1	изучение основных положений квантовой химии и необходимого для их понимания теоретического аппарата квантовой механики
-----	--

**2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП**

Цикл (раздел) ООП:	Б1.В.ДВ.6
--------------------	-----------

**3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**ОПК-1: способностью представлять адекватную современному уровню знаний научную картину мира на основе знания основных положений, законов и методов естественных наук и математики**

**Знать:**

основные определения, правила и законы квантовой химии

**Уметь:**

использовать полученные знания при решении практических задач

**Владеть:**

способностью представлять адекватную современному уровню знаний научную картину мира на основе знания основных положений, законов и методов квантовой химии

**ПК-3: готовностью анализировать и систематизировать результаты исследований, представлять материалы в виде научных отчетов, публикаций, презентаций**

**Знать:****Уметь:****Владеть:****4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Код занятия	Наименование разделов и тем	Вид занятий	Семестр / Курс	Часов	Интеракт.
	<b>Раздел 1.</b>	Раздел			
1.1	Предмет и задачи квантовой химии. Значение квантовой химии в подготовке специалиста. Гипотеза Луи де Бройля. Постоянная Планка. Корпускулярно-волновой дуализм. Эксперименты, подтверждающие гипотезу де Бройля. Опыты Дэвиссона и Джермера. Основные положения квантовой теории	Лек	7	2	0
1.2	Соотношения неопределенностей Гейзенберга и следствия из них. Оператор, линейный оператор, сумма и произведение операторов, коммутативность, собственное значение оператора, эрмитов оператор.	Лек	7	2	0

1.3	Вероятностное описание состояния частицы. Принцип суперпозиции состояний. Условие нормировки волновой функции на единицу. Уравнения Шрёдингера, волновая функция, вероятность, поток вероятности, плотность потока вероятности, закон сохранения вероятности	Лек	7	2	0
1.4	Волновые функции, энергетический спектр, движение частицы в потенциальной яме, туннельный эффект. Водородоподобный атом, волновые функции, состояния водородоподобного атома, распределение плотности вероятности для водородоподобного атома. Решение одномерных квантово-механических задач	Лек	7	2	0
1.5	Приближённые методы квантовой химии. Теория квантовых переходов. Спин. Системы тождественных частиц. Молекулы. Спин электрона. Волновая функция электронов с учетом спина	Лек	7	2	2
1.6	Обнаружение Менделеевым периодичности свойств элементов, принцип Паули и минимума энергии, электронные оболочки атомов, спин, уровни энергии, правило Хунда. Системы тождественных частиц. Молекулы. Волновая функция электронов с учетом спина. Матрицы Паули	Лек	7	2	0
1.7	Двухатомная молекула, приведенная масса, уравнение Шрёдингера для двухатомной молекулы и его решение. Обменное взаимодействие, химическая (ковалентная) связь	Лек	7	2	0
1.8	Метод МО ЛКАО. Расчет малых молекул. Молекула водорода в приближении ЛКАО. Расчет конфигурации молекулярных систем $H_3$ , $H_3^+$ , $H_3^-$ методом МО ЛКАО	Лек	7	2	2
1.9	Метод МО ЛКАО. Расчет малых молекул. Молекула водорода в приближении ЛКАО. Расчет конфигурации молекулярных систем $H_3$ , $H_3^+$ , $H_3^-$ методом МО ЛКАО	Лаб	7	2	0
1.10	Основные приближения метода молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ). Расчет сопряженных углеродных молекул методом МОХ.	Лаб	7	2	0
1.11	Расчет сопряженных молекул методом МОХ (углеродные системы).	Лаб	7	4	2
1.12	Расчет методом МОХ молекул с гетероатомами.	Лаб	7	4	0
1.13	Расчет молекул с гетероатомами на ЭВМ методом МОХ.	Лаб	7	4	2
1.14	Расчет распределения электронной плотности молекул в возбужденных состояниях, расчет электронного спектра молекул. Возможность расчета молекул с ВМВС квантово-химическими методами: состояние различных молекул в растворах.	Пр	7	4	0

1.15	Метод Паризера-Парра-Попла. Расчет электронных спектров молекул методом ППП. Сравнение результатов, полученных в методе МОХ, с данными расчета методом ППП.	Пр	7	4	2
1.16	Знакомство с программой Hyper Chem	Пр	7	4	2
1.17	Полуэмпирические методы квантовой химии	Пр	7	4	0
1.18	Периодическая система элементов Д.И. Менделеева	Ср	7	6	0
1.19	Корпускулярно-волновой дуализм. Основные положения квантовой теории	Ср	7	6	0
1.20	Теория линейных эрмитовых операторов. Решение задач	Ср	7	6	0
1.21	Уравнение Шрёдингера. Решение задач	Ср	7	6	0
1.22	Решение одномерных квантово-механических задач	Ср	7	6	0
1.23	Приближённые методы квантовой химии. Теория квантовых переходов	Ср	7	6	0
1.24	Спин. Системы тождественных частиц. Молекулы. Спин электрона. Волновая функция электронов с учетом спина	Ср	7	8	0
1.25	Принцип Паули. Матрицы Паули	Ср	7	8	0
1.26	Работа с учебной литературой по системе компьютерного моделирования Hyper Chem	Ср	7	8	0

## 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

### 5.1. Контрольные вопросы и задания для текущей аттестации

Оценочные материалы для текущего контроля утвержден протокол №1 от 31.08.2016 г. и является приложением к РПД.

### 5.2. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации

Оценочные материалы для промежуточного контроля утвержден протокол №1 от 31.08.2016 г. и является приложением к РПД.

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

### 6.1. Рекомендуемая литература

#### 6.1.1. Основная литература

	Заглавие	Эл. адрес	Кол-
Л1.1	Кук Д., Новосадов Б. К. - Квантовая теория молекулярных систем. Единый подход: [учеб. пособие] - Долгопрудный: Интеллект, 2012.		10
Л1.2	Ермаков А. И. - Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. Часть 1: Учебник и практикум - М.: Издательство Юрайт, 2017.	<a href="http://www.biblio-online.ru/book/F55EE297-33DF-4B10-B7F7-E9197C0F1490">http://www.biblio-online.ru/book/F55EE297-33DF-4B10-B7F7-E9197C0F1490</a>	1

#### 6.1.2. Дополнительная литература

	Заглавие	Эл. адрес	Кол-
Л2.1	Барановский В.И. - Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие - М.: Академия, 2008.		9

#### 6.1.3. Методические разработки

	Заглавие	Эл. адрес	Кол-
Л3.1	Ермаков А.И. - Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие, доп. УМО - М.: Юрайт, 2010.		1

#### 6.3.1 Перечень программного обеспечения

7.3.1.1	Ауд.220		
7.3.1.2	Microsoft Windows 7 Home Prem (фотография лицензионной наклейки);		
7.3.1.3	Microsoft Office Standard 2007 (Open License: 42266085);		
7.3.1.4	7-Zip (свободная лицензия GNU LGPL);		

7.3.1.5	Adobe Acrobat Reader DC (бесплатное программное обеспечение);
7.3.1.6	Google Chrome (свободная лицензия BSD);
7.3.1.7	Chem Office Professional Academic Edition (Order number: CER5047648).
7.3.1.8	Ауд.146,303
7.3.1.9	Microsoft Windows 7 Professional (Open License: 47818817);
7.3.1.1 0	Microsoft Windows 8 (договор № 0344100007512000081 от 12 декабря 2012 года);
7.3.1.1 1	Microsoft Office Professional Plus 2007 (Open License: 43219389);
7.3.1.1 2	Google Chrome (свободная лицензия BSD);
7.3.1.1 3	7-Zip (свободная лицензия GNU LGPL);
7.3.1.1 4	Adobe Acrobat Reader DC (бесплатное программное обеспечение).
7.3.1.1 5	Microsoft Office Professional 2007 (Open License: 47818817);
<b>6.3.2 Перечень информационных справочных систем</b>	
7.3.2.1	Российский образовательный портал – <a href="http://www.school.edu.ru/">http://www.school.edu.ru/</a>
7.3.2.2	Федеральный портал «Российской образование» – <a href="http://www.edu.ru/">http://www.edu.ru/</a>
7.3.2.3	Университетская информационная система «Россия» – <a href="http://uisrussia.msu.ru">http://uisrussia.msu.ru</a>
7.3.2.4	"Chem Net" химическая информационная сеть - <a href="http://www/chem.msu.ru">www/chem.msu.ru</a>
7.3.2.5	Электронный каталог библиотеки КГУ - <a href="http://195.93.165.10:2280">http://195.93.165.10:2280</a>
7.3.2.6	Научная электронная библиотека - <a href="http://elibrary.ru">http://elibrary.ru</a>
7.3.2.7	Электронная библиотечная система Курского государственного университета <a href="http://library-reader.kursksu.ru">http://library-reader.kursksu.ru</a>
7.3.2.8	Университетская библиотека онлайн - <a href="http://www.biblioclub.ru">http://www.biblioclub.ru</a>
7.3.2.9	
7.3.2.1 0	
7.3.2.1 1	
7.3.2.1 2	

### 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1	Ауд. 215 Лекционная аудитория для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, Экран – 1 шт., мультимедийный проектор Acer P 1165 – 1 шт., мобильный ПК Acer Aspire V5-571MS2361 – 1 шт.,
7.2	набор демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, учебная мебель (столы, стулья, учебная доска).
7.3	Ауд.220 Лаборатория физколлоидной и прикладной химии для проведения практических занятий, занятий лекционного и семинарского типов, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, Вытяжные шкафы – 2 шт., химические реактивы, химическая посуда и спецоборудование, модуль «Электрохимия» учебно-лабораторного комплекса «Общая химия» - 1 шт., иономер лабораторный И-160 – 1 шт., весы «SCOUT» SC – 2 шт., лабораторная электроплитка «Кварц» - 1 шт., мешалка магнитная с подогревом ES-6120 – 1 шт., фотоэлектроколориметр КФК 2 – 3 шт., рефрактометр ИРФ -454 – 1 шт., весы аналитические тип НТ-120CE ViBRA – 2 шт., экран – 1 шт., мультимедийный проектор Acer P 1165 – 1 шт., мобильный ПК Acer Aspire V5-571MS2361 – 1 шт., наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, лабораторная мебель (столы, стулья), учебная доска
7.4	
7.5	
7.6	Помещение для самостоятельной работы обучающихся – читальный зал ауд. 146,
7.7	Моноблок MSI - MS-A912 – 27 шт., моноблок Asus - ET2220I – 13 шт., учебная мебель (столы, стулья).
7.8	Помещение для самостоятельной работы обучающихся – читальный зал, 303
7.9	Моноблок Asus ET220I– 28 шт.
7.10	

**8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Основная задача организации самостоятельной работы студентов - создание психолого-дидактических условий развития интеллектуальной инициативы и мышления на занятиях любой формы.

Цель самостоятельной работы студентов - научить студента осмысленно и самостоятельно работать сначала с учебным материалом, затем с научной информацией, заложить основы самоорганизации и самовоспитания с тем, чтобы привить умение в дальнейшем непрерывно повышать свою квалификацию.

Организация самостоятельной работы студентов при изучении каждой дисциплины должна быть представлена в форме:

1. Внеаудиторная самостоятельная работа;
2. Аудиторная самостоятельная работа, которая осуществляется под непосредственным руководством преподавателя;
3. Научно-исследовательская работа, в том числе творческая.

Виды внеаудиторной самостоятельной работы студентов:

- подготовка к занятиям;
- подготовка и написание рефератов, докладов, очерков и других письменных работ на заданные темы. Студенту желательно предоставить право выбора темы и даже руководителя работы;
- выполнение домашних заданий разнообразного характера. Это - решение задач; перевод и пересказ текстов научных статей; подбор и изучение литературных источников; разработка и составление различных схем; выполнение графических работ; проведение расчетов и др.;
- выполнение индивидуальных заданий, направленных на развитие у студентов самостоятельности и инициативы.

Индивидуальное задание может получать как каждый студент, так и часть студентов группы;

- выполнение курсовых проектов и работ;
- подготовка к участию в научных, научно-практических конференциях, смотрах, олимпиадах и др;
- выполнение ВКР.

Содержание самостоятельной работы студентов регламентируется учебно-методическим комплексом (УМК) по каждой дисциплине; отражается в технологических картах дисциплин, практик и научно-исследовательской деятельности. В соответствующих разделах этих документов должны быть указаны содержание, объем часов, формы контроля, критерии оценки предлагаемой самостоятельной работы. Преподаватели, планируя организацию самостоятельной работы, должны учитывать время, необходимое студентам на ее проведение, наличие в библиотеках и на кафедрах достаточного количества учебной, научной и методической литературы, необходимого оборудования, использования Интернет-ресурсов. Организация и контроль самостоятельной работы студентов реализуется преподавателями за счет часов второй половины дня.