Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Кафедра химии

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ДИСЦИПЛИНЫ

«Б1.Д.Б.28 Квантовая химия»

Уровень высшего образования

СПЕЦИАЛИТЕТ

Специальность
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
(код и наименование специальности)

Аналитическая химия
(наименование направленности (профиля)/специализации образовательной программы)

Квалификация
Химик. Преподаватель химии

Форма обучения
Очная

Год набора 2022

Рабочая программа дисциплины «*Б1.Д.Б.28 Квантовая химия*» рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра химии
наименование кафедры

протокол № 5 от "17" 01 2022 г.

Заведующий кафедрой
Кафедра химии _____ Е.В. Сальникова
наименование кафедры *подпись* *расшифровка подписи*

Исполнители:
Доцент _____ С.А. Пешков
должность *подпись* *расшифровка подписи*

_____ _____ _____
должность *подпись* *расшифровка подписи*

СОГЛАСОВАНО:
Председатель методической комиссии по специальности
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия _____ Е.В. Сальникова
код наименование *личная подпись* *расшифровка подписи*

Заведующий отделом комплектования научной библиотеки
_____ Н.Н. Бигалиева
личная подпись *расшифровка подписи*

Уполномоченный по качеству факультета
_____ А.Н. Сизенцов
личная подпись *расшифровка подписи*

№ регистрации _____

© Пешков С.А., 2022
© ОГУ, 2022

1 Цели и задачи освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины «Компьютерной химия» является формирование профессиональной компетентности выпускника, получение студентами знаний о постановке задачи и реализации научной, творческой работы на основе исследований механизмов химических реакций и каталитических процессов в органической, неорганической аналитической химии и биохимии. Используя современные знания полуэмпирических и неэмпирических методов квантовой химии, а также способы обработки результатов расчетов, выявить связи между распределением электронной и спиновой плотности и структурой переходного состояния (каталитического центра) нанообъектов; научиться оценивать изменения химических и физико-химических свойств молекул и комплексов при протекании химических реакций, на основе принципов, положенных в основу квантовой механики.

Задачи:

1) теоретический компонент:

- посредством самостоятельного изучения научной литературы и консультаций преподавателя, а также слушания, конспектирования и реферирования изучить информацию о рассматриваемой химической (каталитической, ферментативной) реакции;
- знать сущность, используемых квантовохимических методов, при исследовании различных типов реакций и процессов в химии;
- владеть основами анализа расчетов;

2) познавательный компонент:

- понимать роль теоретического анализа;
- иметь представление об особенностях исследуемых объектов;
- владеть методологией выбора методов расчета и используемых базисов;

3) практический компонент:

- уметь с пользой применять знания по квантовой химии на практике;
- освоить современные методы расчета электронной структуры веществ в газовой, жидкой твердой фазах и уметь их применять для конкретных практических задач.

2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к базовой части блока Д «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.17 Физика, Б1.Д.Б.18 Общий физический практикум*

Постреквизиты дисциплины: *Б1.Д.В.8 Строение вещества, Б1.Д.В.11 Компьютерная химия*

3 Требования к результатам обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих результатов обучения

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать	ОПК-4-В-1 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности ОПК-4-В-2 Обрабатывает данные с	**Знать:** - основные источники информации для решения задач профессиональной сферы деятельности.

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик ОПК-4-В-3 Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	**Уметь:** - проводить первичный поиск информации для решения профессиональных задач; - применять стандартное программное обеспечение при решении химических и материаловедческих задач, при подготовке научных публикаций и докладов. **Владеть:** - навыками работы с научными и образовательными порталами

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 7 зачетных единиц (252 академических часа).

Вид работы	Трудоемкость, академических часов		
	3 семестр	4 семестр	всего
Общая трудоёмкость	**144**	**108**	**252**
Контактная работа:	**68,25**	**69,25**	**137,5**
Лекции (Л)	34	34	68
Лабораторные работы (ЛР)	34	34	68
Консультации		1	1
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25	0,5
Самостоятельная работа: *- самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий;* *- подготовка к лабораторным занятиям;* *- подготовка к рубежному контролю и т.п.)*	**75,75**	**38,75**	**114,5**
Вид итогового контроля (зачет, экзамен, дифференцированный зачет)	**зачет**	**экзамен**	

Разделы дисциплины, изучаемые в 3 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Теоретические основы квантовой механики	46	10		4	32
2	Атом водорода	30	12		10	8

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
3	Многоэлектронный атом	68	12		20	36
	Итого:	144	34		34	76

Разделы дисциплины, изучаемые в 4 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
4	Квантово-химические методы расчета электронной структуры	144	34		34	40
	Итого:	108	34		34	40
	Всего:	252	68		68	116

4.2 Содержание разделов дисциплины

№ 1 Квантовая механика. Теоретические основы квантовой механики. Предмет квантовой механики и ее место среди других наук. Предпосылки возникновения квантовой механики. Проблемы, возникшие при описании свойств элементарных частиц, с точки зрения классической механики. Строение атома. Основные понятия квантовой механики. Постулаты квантовой механики. Матричная механика Гейзенберга. Уравнение Шреденгера. Операторы и действия над ними. Свойства С.Ф. и С.З. эрмитовых операторов. Операторы импульса, момента импульса, энергии. Матричное представление операторов. Статистический смысл волновой функции. Условия одновременного определения двух физических величин. Принцип неопределенности Гейзенберга. Свободное движение частицы. Волны Де Бройля. Представление Дирака. Частица в потенциальном ящике с бесконечно высокими стенами. Потенциальный барьер. Гармонический осциллятор.

№ 2 Атом водорода. Частица в центрально симметричном поле. Жесткий ротатор. Атом водорода (разделение переменных). Радиальная часть (полиномы Лагерра). Сферическая часть (шаровые функции, полиномы Лежандра). Форма электронных облаков. Спин электрона. Операторы спина. Одноэлектронные спиновые функции. Водородоподобный атом и атомные орбитали

№ 3 Многоэлектронный атом. Многоэлектронный атом. А.О. Слейтера. Приближения квантовой химии: одноэлектронное приближение (детерминант Слейтера), вариационный принцип (вывод секулярных уравнений). Метод ВС. Молекула и химическая связь. Атом водорода по Гайтлеру -Лондону. Метод МО. Симметрия и диаграмма МО 2-х атомных гомоядерных молекул. Молекулярные параметры.

№ 4 Квантово-химические методы расчета электронной структуры. Метод Хюккеля. Индексы электронной структуры. Расчет электронных свойств молекул этилена, бутадиена. Проблема гетероатомов. Применение элементов симметрии при упрощении детерминанта Хюккеля. Альтернантные У.В. и их свойства. Расчет коэффицентов несвязывающей М.О нечетных альтернантных У.В. Уравнения Хартри-Фока. Уравнения Рутаана. Электронная корреляция. Метод самосогласованного поля (ССП). Метод конфигурационного взаимодействия (КВ). Полуэмпирические и неэмпирические методы квантовой химии.

4.3 Лабораторные работы

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
1		Правила техники безопасности и техника выполнения лабораторных работ.	2
2	4	Знакомство с программой HyperChem, базы данных, построение	2

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
		молекул.	
3	1, 4	Создание собственной выборки в Excel, расчет молекул с помощью методов молекулярной механики.	2
4	4	Расчет молекул методами полуэмпирики, визуализация молекулярных орбиталей.	4
5	4	Расчет молекул неэмпирическими методами.	4
6	1-3	Семинар. Сравнительный анализ между различными методами и экспериментом.	2
7	4	Учет сольватационных эффектов.	2
8	4	Построение карты электростатического потенциала (МЭП)	4
9	4	Расчет молекул при различных температурах.	2
10	4	ИК-спектры, ЯМР-спектры.	4
11	4	Построение сечения ППЭ для одной связи, двух связей, химической реакции.	8
12	4	Симметрия, создание Z-матрицы.	4
13	4	Конформационный анализ. Гомологи.	6
14	4	Термодинамические циклы.	4
15	4	Моделирование реакции диссоциации протона водорода	2
16	4	Расчет энергии активации.	2
17	3	Вариационный принцип. Секулярные уравнения.	2
18	3, 4	Метод Хюккеля. Простейшие примеры расчетов зарядов на атомах, порядков связей.	2
19	3	Построение А.О. Слейтера. (вычисление константы экранирования).	2
20	4	Расчет спектральных характеристик молекул и комплексов методом КВ и МК ССП.	8
		Итого:	68

5 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

5.1 Основная литература

1. Пешков, С. А. Теоретические основы квантовой и физической химии [Электронный ресурс] : учебное пособие для обучающихся по программам высшего образования по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, и по направлению подготовки 04.03.01 Химия / С. А. Пешков; М-во науки и высш. образования Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Электрон. дан. - Оренбург : ОГУ, 2021. - ISBN 978-5-7410-2586-4..

2. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия: учеб. для хим. спец. вузов / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко.- 7-е изд., стер. - М. : Высш. шк., 2009. - 528 с.

3. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие для вузов / А. И. Ермаков. - М. : Юрайт, 2010. - 556 с.

5.2 Дополнительная литература

1. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учебное пособие / В. И. Барановский.- 2-е изд., испр. и доп. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 427 с. : ил. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Прил.: с. 407-420. - Библиогр.: с. 421.

2. Степанов Н.Ф, Квантовая механика и квантовая химия М.: Мир, Изд. МГУ 2001. 519 с.

3. Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков: Учеб. пособие, 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 1980. 215 с.
4. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир, 1979. 504 с.
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.: Высш. шк., 1979, 2001. 407 с.

5.3 Периодические издания

1. Успехи химии: журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
2. Кинетика и катализ: журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
3. Известия РАН, сер. Химическая: журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
4. Доклады академии наук (ДАН) : журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
5. Журнал неорганической химии: журнал. - М.: АРСМИ
6. Журнал физической химии. - М.: Агентство "Роспечать".

5.4 Интернет-ресурсы

1. Сайт Гигапедия. Книги по химии на английском языке; книги по квантовой химии, спектроскопии djvu-inf.narod.ru/nclib.html
2. База данных о рентгеноструктурном анализе соединений и атомных термах NIST www.nist.gov > PML > Publications
3. Quantum Chemistry with Wavefunction Spartan www.computational-chemistry.co.uk
4. Quantum Chemistry Software - MOLCAS www.molcas.org/introduction.html
5. Официальный сайт А.А. Грановского http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html
6. Научная электронная библиотека - http://elibrary.ru/defaultx.asp.
7. Электронная библиотека Российской государственной библиотеки (РГБ) - http://elibrary.rsl.ru/.
8. Мировая цифровая библиотека - http://www.wdl.org/ru/.
9. Публичная Электронная Библиотека (области знания: гуманитарные и естественнонаучные) - http://lib.walla.ru/.
10. Электронная библиотека IQlib (образовательные издания, электронные учебники, справочные и учебные пособия) - http://www.iqlib.ru/.
11. Электронная библиотека Санкт-Петербургского государственного политехнического университета (методическая и учебная литература, создаваемая в электронном виде авторами СПбГТУ по профилю образовательной и научной деятельности университета) - http://www.unilib.neva.ru/rus/lib/resources/elib/.
12. Научная библиотека МГУ имени М.В. Ломоносова - http://nbmgu.ru/

5.5 Программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. ГАРАНТ Платформа F1 [Электронный ресурс]: справочно-правовая система. / Разработчик ООО НПП «ГАРАНТ-Сервис», 119992, Москва, Воробьевы горы, МГУ, [1990–2019]. – Режим доступа в сети ОГУ для установки системы: \\fileserver1\GarantClient\garant.exe
2. Консультант Плюс [Электронный ресурс]: электронное периодическое издание справочная правовая система. / Разработчик ЗАО «Консультант Плюс», [1992–2019]. – Режим доступа к системе в сети ОГУ для установки системы: \\fileserver1\!CONSULT\cons.exe
3. Web of Science [Электронный ресурс]: реферативная база данных / компания Clarivate Analytics. – Режим доступа :http://apps.webofknowledge.com/, в локальной сети ОГУ.
4. American Chemical Society [Электронный ресурс] : база данных. – Режим доступа: https://www.acs.org/content/acs/en.html, в локальной сети ОГУ.
5. RoyalSocietyofChemistry[Электронный ресурс] : полнотекстовая база данных / Королевское химическое общество Великобритании. – Режим доступа :http://pubs.rsc.org/, в локальной сети ОГУ.
6. GAMESS (бесплатно распространяемый пакет программ)

7. DALTON (бесплатно распространяемый пакет программ)
8. Firefly 8.1 (бесплатно распространяемый пакет программ)
9. Операционная система MicrosoftWindows (В рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ).
10. Пакет настольных приложений Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint, OneNote, Outlook, Publisher, Access). (В рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ) для подготовки текстовых документов, обработки экспериментальных результатов и демонстрации презентаций.
11. Автоматизированная интерактивная система сетевого тестирования - АИССТ (зарегистрирована в РОСПАТЕНТ, Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011610456, правообладатель – Оренбургский государственный университет), режим доступа - http://aist.osu.ru.

6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Аудитории оснащены комплектами ученической мебели, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Для проведения лабораторных работ по курсу химии каждая лаборатория оборудована:

1) Вытяжным шкафом;
2) Рабочими столами;
3) Штативами для индивидуального набора реактивов и лабораторных принадлежностей;
4) Штативы с пробирками;
5) Набором оборудования общего пользования (эксикатор, кристаллизатор, промывалки, пинцет, тигельные щипцы, ерши для мытья посуды);
6) Наборами химической посуды;
7) Приборами (сушильный шкаф, муфельная печь, аналитические весы, РН-метр фотоэлектроколориметр)
8) Таблицами и плакатами.
9) Набором необходимых химических реактивов.

Лаборатории оснащены оборудованием (холодильники, дефлегматоры, кристаллизаторы, эксикаторы, штативы), приборами (нагревательные приборы, термометры, водяные и масляные бани, прибор Жукова, пикнометр, рефрактометр, прибор для фракционной разгонки при атмосферном давлении, прибор для вакуумной перегонки, прибор для перегонки с водяным паром), химической посудой (пробирки, химические стаканы, колбы, мерная посуда, воронки, фарфоровые чашки) и химическими реактивами, необходимыми для проведения лабораторных опытов. Имеются шаростержневые модели молекул и образцы различных полимерных соединений. В лабораториях предусмотрены аптечка, индивидуальные средства защиты, а также средства пожаротушения.

Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой, подключенной к сети "Интернет", и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ОГУ.