

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»
(ФГБОУ ВО «КНИТУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УР
А.В. Бурмистров
«14» 11 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

По дисциплине Б1.В.ДВ.9.2 «Квантовая химия»
Направление подготовки **18.03.01 – «Химическая технология»**
Профили подготовки «Технология неорганических веществ», «Технология тугоплавких неметаллических и силикатных материалов»
Квалификация (степень) выпускника БАКАЛАВР
Форма обучения ОЧНАЯ
Институт, факультет Нефти, химии и нанотехнологий, химических технологий
Кафедра-разработчик рабочей программы Технология неорганических веществ и материалов
Курс 4, семестр 1

Лекции	Часы	Зачетные единицы
Лекции	18	
Практические занятия		
Лабораторные занятия	36	
Самостоятельная работа	54	
Форма аттестации		
Зачет		
Всего	108	3

Казань, 2017 г.

Рабочая программа составлена с учетом требований Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования N1005 от 11.08.2016 по направлению 18.03.01 «Химическая технология» по профилям «Технология неорганических веществ» и «Технология тугоплавких неметаллических и силикатных материалов» на основании учебного плана 2017 года набора обучающихся.

Разработчик программы

Доцент



Юсупова А.А.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ТНВМ

протокол от 13 11 2017 г. № 5

Зав. кафедрой



Хапρινов А.И.

УТВЕРЖДЕНО

Протокол заседания методической комиссии факультета Химических технологий, к которому относится кафедра-разработчик РП

от 16 11 2017 г. № 3

Председатель комиссии, доцент



Виноградова С.С.

Начальник УМЦ



Китасева Л.А.

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины **«Квантовая химия»** являются:

- а) формирование знаний о основных положениях квантовой механики;
- б) обучение навыками работы с программой визуализации Chemcraft для исследования строения молекулярных систем;
- в) приобретение практических навыков проведения расчетов с использованием квантово-химических программ «Priroda 6» и «Gaussin 98» для оптимизации изучаемых объектов.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина **«Квантовая химия»** относится к вариативной; дисциплины по выбору ОП и формирует у бакалавров по направлению подготовки «Химическая технология» набор знаний, умений, навыков и компетенций, необходимых для выполнения производственно-технологической и научно-исследовательской деятельности.

Для успешного освоения дисциплины **«Квантовая химия»** бакалавр по направлению подготовки «Химическая технология» должен освоить материал предшествующих дисциплин:

- а) Б1.Б.6 Математика.
- б) Б1.Б.7 Информатика.
- в) Б1.Б.10 Общая и неорганическая химия.
- г) Б1.Б.19 Общая химическая технология.
- д) Б1.В.ОД.2 Вычислительная математика.
- е) Б1.В.ДВ.6.1 Кристаллохимия.
- ж) Б1.В.ДВ.6.2 Минералогия и кристаллография.

Дисциплина **«Квантовая химия»** является предшествующей и необходима для успешного усвоения последующих дисциплин:

- а) Б1.В.ДВ.11.1 Технология основного неорганического синтеза.

Знания, полученные при изучении дисциплины **«Квантовая химия»** могут быть использованы при прохождении практик (учебной, производственной, преддипломной) и выполнении выпускной квалификационной работы по направлению подготовки «Химическая технология».

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

- 1. ОПК–1 способностью и готовностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности;
- 2. ПК–2 готовностью применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной

области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования;

3. ПК–16 способностью планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

1) Знать:

а) основные положения квантовой механики и современной теории химической связи;

б) принципы описания атомной и электронной структуры молекулярных систем;

в) основные взаимосвязи между электронной структурой и физико-химическими свойствами веществ;

г) возможности основных современных квантово-химических программ и области их применения.

2) Уметь:

а) применять квантово-химические подходы и методы для интерпретации и предсказания строения и свойств молекулярных систем.

3) Владеть:

а) навыками применения квантово-химических подходов и методов при решении практических технологических задач, стандартными квантово-химическими компьютерными программами.

Структура и содержание дисциплины «Квантовая химия»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

№ п/ п	Раздел дисциплины	Семестр	Виды учебной работы (в часах)			Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации по разделам
			Лек- ции	Лабора- торные работы	СРС	
1	Основные постулаты квантовой механики	7	4	4	16	Реферат, отчет по лабораторной работе
2	Теория электронного строения молекул.	7	5	4	16	Реферат, отчет по лабораторной работе

3	Методы квантовой химии	7	5	14	11	Реферат, отчет по лабораторной работе
4	Современные квантово-химические программы.	7	4	14	11	Реферат, отчет по лабораторной работе
Форма аттестации						Зачет

5. Содержание лекционных занятий по темам с указанием формируемых компетенций.

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Тема лекционного занятия	Краткое содержание	Формируемые компетенции
1	Основные постулаты квантовой механики	4	Строение электронной оболочки атома.	Строение электронной оболочки атома. Волновая функция электрона, уравнение Шредингера, его решение для простейших задач.	ОПК–1, ПК-2, ПК-16
2	Теория электронного строения молекул.	5	Молекулярные орбитали. Проблема учета электронной корреляции.	Молекулярные орбитали. Проблема учета электронной корреляции. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.. Координатные и спинные функции. Синглетные и триплетные состояния. Метод валентных связей. Теория отталкивания электронных пар валентных орбиталей.	ОПК–1, ПК-2, ПК-16
3	Методы квантовой химии	5	Ограниченный и неограниченный методы Хартри – Фока. Корреляционные	Ограниченный и неограниченный методы Хартри – Фока. Корреляционные	ОПК–1, ПК-2, ПК-16

			методы	методы Полуэмперические методы квантовой химии. Квантово- химические методы и базисные наборы в неэмперических методах. . Понятие базиса в квантовой химии	
4	Современные квантово- химические программы.	4	Современные квантово- химические программы, их возможности, сравнительная оценка.	Современные квантово- химические программы, их возможности, сравнительная оценка. Квантово - химическое описание поверхности потенциальной энергии. Путь реакции и координата реакции на поверхности потенциальной энергии. Программы- визуализаторы	ОПК–1, ПК-2, ПК-16

6. Содержание практических/семинарских занятий (не предусмотрены рабочим планом)

7. Содержание лабораторных занятий

Цель проведения лабораторных занятий – освоение методов решения квантово-механических задач для решение прикладных задач квантовой химии.

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Наименование лабораторной работы	Формируемые компетенции
1	Основные постулаты квантовой механики	4	1. Общая характеристика программы, подготовка исходных данных, основная группа команд	ОПК–1, ПК-2
2	Теория электронного строения молекул.	4	1. Неэмпирический квантово-химический расчет молекулы	ОПК–1, ПК-2, ПК-16
3	Методы квантовой	14	1. Полуэмпирический	ОПК–1, ПК-2, ПК-16

	химии		квантово-химический расчет молекулы (8 часов) 2. Интерпретация результатов расчета (6 часов).	
4	Современные квантово-химические программы.	14	1. Расчет и инфракрасного спектра молекулы (4 часа) 2. Расчет барьеров вращения (4 часов) 3. Расчет энергии активации реакции (6 часов)	ОПК-1, ПК-2, ПК-16

Лабораторные работы проводятся в компьютерном классе с использованием соответствующего программного обеспечения.

8. Самостоятельная работа бакалавра

№ п/п	Темы, выносимые на самостоятельную работу	Часы	Форма СРС	Формируемые компетенции
1	Математический аппарат квантовой химии	11	Реферат	ОПК-1, ПК-2
2	Электронное строение атома. Атомные термы	11	Реферат	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
3	Метод молекулярных орбиталей. Метод Хюккеля	11	Реферат	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
4	Современные квантово-химические программы.	11	Реферат	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
5	Подготовка к сдаче лабораторных работ	10		ОПК-1, ПК-2, ПК-16

9. Использование рейтинговой системы оценки знаний.

Форма аттестации по дисциплине – зачет.

Максимальный рейтинг студента по дисциплине $R_{\text{дис}}$ равен 100 баллам и определяется в общем случае по формуле (2)

$$R_{\text{дис}} = R_{\text{тек}} + R_{\text{экз}},$$

где $R_{\text{тек}}$ – балл за текущую работу студента в течение семестра(1); $R_{\text{экз}}$ – балл, полученный студентом при сдаче экзамена.

Текущий контроль проводится в конце семестра и отражает степень усвоения дисциплины за семестр. Данный контроль является следующим уровнем контрольных мероприятий. Конкретные сроки проведения текущего контроля успеваемости студентов, согласуются с семестровыми учебными планами групп, утвержденными ректором, и доводятся в начале семестра до преподавателей и студентов.

Объем и уровень усвоения студентами учебного материала дисциплины оцениваются комплексной рейтинговой оценкой, выраженной в процентах $R_{\text{тек}}$ (текущим рейтингом)(1), включающей в себя:

$$R_{\text{T}} = R_{\text{пром}} + \Pi + K,$$

-результаты промежуточного контроля ($R_{\text{пром}}$) - оценка теоретических знаний, практических умений и навыков, проявленных студентами на всех формах занятий в период освоения модуля рабочей программы дисциплины. Рейтинг $R_{\text{пром}}$ определяется как сумма баллов (с учетом понижающих коэффициентов) полученных за все этапы промежуточного контроля.

-оценку посещаемости занятий (П)

-выполнение нетиповых заданий повышенной сложности (Н): участие в олимпиадах, научно-исследовательской работе кафедры, написание рефератов и выполнение других работ, углубляющих знания по данной дисциплине. За выполнение таких заданий (которые не являются обязательными, и выполняются только по желанию) могут начисляться дополнительные (премиальные) аттестационные баллы. Премиальные баллы не должны превышать 40 баллов. Выдача заданий студентам осуществляется в начале изучения дисциплины. Зачет работ производится на последней неделе после всех запланированных аттестационных работ.

- результаты контрольного испытания (К).

При изучении дисциплины предусматривается **Зачет**, защита лабораторных работ, реферат. За эти контрольные точки студент может получить минимальное и максимальное количество баллов (см. таблицу).

Максимальный рейтинг бакалавра по дисциплине $R_{\text{дис}}$ равен 100 баллам.

<i>Оценочные средства</i>	<i>Кол-во</i>	<i>Min, баллов</i>	<i>Max, баллов</i>
<i>Отчет по лабораторной работе</i>	4	5	12
<i>Реферат</i>	1	5	12
<i>Итоговый контроль</i>		24	60
<i>Итого:</i>		60	100

Итоговая контрольная точка – зачёт.

В этом случае рейтинг по дисциплине $R_{\text{дис}}$ совпадает с $R_{\text{тек}}$. Предмет считается усвоенным и проставляется отметка о зачете, если студентом выполнены все текущие контрольные точки и сумма баллов, набранных за текущую работу в семестре, не менее 60.

Таблица – перерасчет рейтинга в 4-балльную шкалу оценки

Интервал баллов рейтинга	Оценка
$0 \leq R_{\text{дис}} < 60$	«неудовлетворительно» (2)
$60 \leq R_{\text{дис}} < 73$	«удовлетворительно» (3)
$73 \leq R_{\text{дис}} < 87$	«хорошо» (4)
$87 \leq R_{\text{дис}} < 100$	«отлично» (5)

10. Информационно-методическое обеспечение дисциплины

10.1 Основная литература

При изучении дисциплины «**Квантовая химия**» в качестве основных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу.

Основные источники информации	Кол-во экз.
1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / Цирельсон В.Г. — Moscow: БИНОМ, 2014. —Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 3-е изд., испр. (эл.). - М.: БИНОМ, 2014. —ISBN 978-5-9963-2362-3.	ЭБС Консультант студента http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996310982.html Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ
2. Зиятдинов, Н.Н. Системный анализ химико-технологических процессов с использованием программы CHEMCAD [Учебники]: учеб.-метод. пособие /Казан. гос. технол. ун-т .—Казань, 2009 .—212 с. ISBN 978-5-7882-0806-0.	160 экз. в УНИЦ КНИТУ
3. Крашенинин, В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс]: учеб. пособие /В.И. Крашенинин, Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина. —Электрон. дан. — Кемерово: КемГУ, 2012. —56 с.	ЭБС Лань https://e.lanbook.com/book/44352 . Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ

В качестве дополнительных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу:

Дополнительные источники информации	Кол-во экз.
1. Ивановский, А.Л. Квантовая химия в материаловедении. Неметаллические тугоплавкие соединения и неметаллическая керамика [Монографии] / Ин-т химии твердого тела. —Екатеринбург, 2000. —180 с. : ил., табл. — Библиогр. в конце каж. главы.	5 экз. в УНИЦ КНИТУ
2. Ивановский, А.Л. Квантовая химия в материаловедении. Бор, его сплавы и соединения / Ин-т химии твердого тела УрО РАН; /Отв. ред. Ю.Г. Зайнуллин. —Екатеринбург: Екатеринбург, 1997. — 400 с.: ил. —Библиогр.: с.391-395.	2 экз. в УНИЦ КНИТУ
3. Губанов, В.А. Квантовая химия твердого тела / Уральск. науч. центр АН СССР; Отв. ред. С.В. Вонсовский. —М.: Наука, 1984. —304 с. : ил. — Библиогр. в конце глав.	1 экз. в УНИЦ КНИТУ
4. Харченко, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Учебники]: учеб. пособие для студ. спец. 020101 "Химия" / Читинский гос. ун-т. —Чита, 2006. —138 с.: ил. — Библиогр.: с.134 (12 назв.). Алф. указ.: с.135-136 .	1 экз. в УНИЦ КНИТУ

5. Грибов, Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул: Учебное пособие. — 1. — Долгопрудный: Издательский дом "Интеллект", 2010. — 312 с.

ЭБС Znanium.com
<http://znanium.com/go.php?id=193501>
 Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ

Долгопрудный: Издательский дом "Интеллект", 2010. — 312 с.	501 Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ
6. Абаренков, И.В. Начала квантовой химии [Учебники]: учеб. пособие для ун-тов по спец. "Химия". — М.: Высш. шк., 1989. — 302, [1] с.: ил. — Библиогр.: с. 297-298 (43 назв.).	2 экз. в УНИЦ КНИТУ

11.3 Электронные источники информации

При изучении дисциплины «Квантовая химия» рекомендуется использование электронных источников информации:

1. Сайт о химии [Электронный ресурс]: <http://www.xumuk.ru>.
2. Квантовая химия РХТУ. [Электронный ресурс]: <http://www.quant.distant.ru>.
3. Журнал структурной химии. [Электронный ресурс]: <http://jsc.niic.nsc.ru>.
4. Популярная механика [Электронный ресурс]: <http://www.popmech.ru>.
5. Академик. [Электронный ресурс]: <http://www.dic.academic.ru>.
6. Курс квантовой химии [Электронный ресурс]: <http://www.onlearning.ru/kvantovaya-himiya>.
7. Электронный каталог УНИЦ КНИТУ. — Режим доступа: <http://ruslan.kstu.ru>
8. Электронная библиотека УНИЦ КНИТУ. — Режим доступа: <http://ft.kstu.ru>
9. ЭБС Znanium.com. - Режим доступа: <http://znanium.com>
10. ЭБС Лань. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com>

Согласовано:
 Зав. сектором ОКУФ



11. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации обучающихся разрабатываются согласно положению о Фондах оценочных средств, рассматриваются как составная часть рабочей программы и оформляются отдельным документом.

12. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля).

1. Лекционные занятия:

- a. комплект электронных презентаций/слайдов;
- b. аудитория, оснащенная презентационной техникой - проектор, экран, компьютер/ноутбук;

2. Лабораторные занятия:

- a. рабочее место преподавателя, оснащенное компьютером с доступом в Интернет;
- b. рабочие места бакалавров, оснащенные компьютерами с доступом в Интернет, предназначенные для работы в электронной образовательной среде.

13. Образовательные технологии

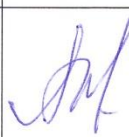
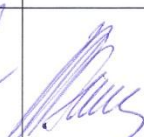
Удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах: 9 часов лекций, 36 часов лабораторных работ.

Основные интерактивные формы проведения учебных занятий:

- творческие задания;
- работа в малых группах.

Лист переутверждения рабочей программы

Рабочая программа по дисциплине «Квантовая химия» рассмотрена на заседании кафедры Технологии неорганических веществ и материалов

№ п/п	Дата переутверждения РП (протокол заседания кафедры № от 20)	Наличие изменений	Наличие изменений в списке литературы	Подпись разработчика РП	Подпись заведующего кафедрой	Подпись начальника УМЦ Китаева Л.А.
1	Протокол заседания кафедры ТНВМ № 1 от 29.08 2019	нет <u>есть</u> *	Нет			

Направление подготовки – 18.03.01 – Химическая технология
 Профиль – Технологии неорганических веществ в
 год набора обучающихся – 2019

* Грехи Профессиональное баз данных и информа-
 ционные справочные системы:

1. Российский информационный портал в области
 науки, технологии, медицины и образования
 ELIBRARY.RU: elivchay.ru

Лицензированное свободно распространяемое
 программное обеспечение:

1. Офисные и деловые программы MS Office 2007
 Russian