

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Казанский национальный исследовательский  
технологический университет»  
(ФГБОУ ВО «КНИТУ»)

**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор по учебной работе

Д.Ш. Султанова

«07» июня 2021 г.



Рабочая программа дисциплины в виде электронного документа выгружена из информационной системы управления университетом и соответствует оригиналу  
Простая электронная подпись, ID подписи: 1060  
Подписал Проректор по учебной работе Д.Ш. Султанова  
Дата 07.06.2021

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**  
по дисциплине «КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»

Направление подготовки:	18.03.01 Химическая технология
Профиль:	Технология неорганических веществ
Квалификация выпускника:	Бакалавр
Форма обучения:	Заочная
Институт:	Институт нефти, химии и нанотехнологии
Факультет:	Факультет химических технологий
Кафедра-разработчик:	Кафедра «Технологии неорганических веществ и материалов»
Курс; семестр	4-5; 12, 14

Вид нагрузки	Часы	Зачётные единицы
Лекция	6	0,17
Лабораторная работа	4	0,11
Контроль самостоятельной работы	10	0,28
Самостоятельная работа	84	2,33
Форма аттестации: Зачет (14 сем), Контрольная работа (14 сем)	4	0,11
Всего	108	3

Рабочая программа составлена с учётом требований Федерального государственного образовательного стандарта (приказ № 922 от 07.08.2020) по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология для профиля «Технология неорганических веществ» на основании учебных планов набора обучающихся 2021 года.

Разработчик программы:

Доцент

А.А. Юсупова

---

### **СОГЛАСОВАНО**

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры «Технологии неорганических веществ и материалов», протокол от 04.06.2021 г. № 11.

Заведующий кафедрой *Согласовано* А.И. Хацринов

### **УТВЕРЖДЕНО**

Начальник центра УМЦ

*Утверждаю*

Л.А. Китаева

## **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 в структуре образовательной программы**

Дисциплина «Квантовая химия» относится к формируемой участниками образовательных отношений части ООП и формирует у обучающихся по профилю «Технология неорганических веществ» набор знаний, умений, навыков и компетенций.

Для успешного освоения дисциплины «Квантовая химия» обучающийся по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология» должен освоить материал предшествующих дисциплин:

1. Введение в специальность "Технология неорганических веществ"
2. Кристаллохимия
3. Общая и неорганическая химия
4. Реакционная способность химических соединений
5. Современные методы исследования в неорганической технологии
6. Теоретические основы технологии неорганических веществ
7. Физическая химия
8. Химическая технология неорганических веществ (часть 1)

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

1. Современные технологии неорганических материалов

## **3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины**

**ПК-4 Способен использовать знание свойств химических элементов, неорганических соединений и материалов на их основе, применять пакеты прикладных программ в технологии неорганических веществ**

ПК-4.1. Знает фундаментальные принципы взаимосвязи между составом, строением, свойствами и реакционной способностью неорганических соединений

ПК-4.2. Умеет использовать теоретические основы неорганической технологии для решения задач профессиональной деятельности

ПК-4.3. Владеет навыками использования пакета прикладных программ в технологии неорганических веществ

**В результате освоения дисциплины обучающийся должен**

**Знать:**

- основные положения квантовой механики и современной теории химической связи;
- принципы описания атомной и электронной структуры молекулярных систем;
- основные взаимосвязи между электронной структурой и физико-химическими свойствами веществ и реакционной способностью неорганических соединений;
- возможности основных современных квантово-химических программ и области их применения

**Уметь:**

применять квантово-химические подходы и методы для интерпретации и предсказания строения и свойств молекулярных систем, энергозатрат процессов в технологии неорганических веществ.

**Владеть:**

навыками применения квантово-химических подходов и методов при решении практических технологических задач в технологии неорганических веществ, квантово-химическими компьютерными программами «Priroda», «Gaussian» и программ-визуализаторов Chemcraft и GaussView.

#### 4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Виды учебной работы (в часах)					Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестации
			Лекция	Практические занятия	Лабораторные	КСР	СРС	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	Основные постулаты квантовой механики	12	2				7	Контрольная работа
	<b>Итого по семестру</b>	<b>12</b>	<b>2</b>				<b>7</b>	
1.	Теория электронного строения молекул	14	1		1	3	25	Контрольная работа; Лабораторная работа; Реферат
2.	Методы квантовой химии	14	1		3	3	25	
3.	Современные квантово-химические программы	14	2			4	27	Контрольная работа; Реферат
	<b>Итого по семестру</b>	<b>14</b>	<b>4</b>		<b>4</b>	<b>10</b>	<b>77</b>	<b>Зачет, Контрольная работа</b>

#### 5. Содержание лекционных занятий по темам

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Тема лекционного занятия	Индикаторы достижения компетенции
1	2	3	4	5
1.	Основные постулаты квантовой механики	2	Строение электронной оболочки атома	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
2.	Теория электронного строения молекул	1	Молекулярные орбитали. Проблема учета электронной корреляции	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
3.	Методы квантовой химии	1	Ограниченный и неограниченный методы Хартри – Фока. Корреляционные методы	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
4.	Современные квантово-химические программы	2	Современные квантово-химические программы, их возможности, сравнительная оценка	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
	<b>ВСЕГО</b>	<b>6</b>		

#### 6. Содержание практических/семинарских занятий

Проведение практических/семинарских занятий не предусмотрено учебным планом

## 7. Содержание лабораторных занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Тема занятия	Индикаторы достижения компетенции
1	2	3	4	6
1.	Теория электронного строения молекул	1	Общая характеристика программы, подготовка исходных данных, основная группа команд	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
2.	Методы квантовой химии	2	Полуэмпирический квантово-химический расчет молекулы	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
3.		1	Интерпретация результатов расчета молекулы, радикала.	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
<b>ВСЕГО</b>		<b>4</b>		

## 8. Самостоятельная работа

№ п/п	Темы, выносимые на самостоятельную работу	Часы	Форма СРС	Индикаторы достижения компетенции
1	2	3	5	6
1.	Математический аппарат квантовой химии	7	написание реферата, подготовка к лабораторной работе, проработка тем отведенных для самостоятельной работы	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
2.	Электронное строение атома. Атомные термы	25	написание реферата, подготовка к лабораторной работе, проработка тем отведенных для самостоятельной работы	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
3.	Метод молекулярных орбиталей. Метод Хюккеля	25	написание реферата, подготовка к лабораторной работе, проработка тем отведенных для самостоятельной работы	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
4.	Границы применимости методов квантовой химии на примере расчётов различных молекул	27	написание реферата, подготовка к лабораторной работе, проработка тем отведенных для самостоятельной работы	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
<b>ВСЕГО</b>		<b>84</b>		

### 8.1 Контроль самостоятельной работы

№ п/п	Темы, выносимые на самостоятельную работу	Часы	Форма КСР	Индикаторы достижения компетенции
1	2	3	5	6
1.	Электронное строение атома. Атомные термы	3	прием лабораторной работы, проверка реферата	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
2.	Метод молекулярных орбиталей. Метод Хюккеля	3	прием лабораторной работы, проверка реферата	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
3.	Границы применимости методов квантовой химии на примере расчётов различных молекул	4	прием лабораторной работы, проверка кейс-задач, проверка реферата	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3
<b>ВСЕГО</b>		<b>10</b>		

## 9. Использование рейтинговой системы оценки знаний

При оценке результатов деятельности обучающихся в рамках дисциплины «Квантовая химия» используется рейтинговая система. Максимальное и минимальное количество баллов по

различным видам учебной работы описано в «Положении о балльно-рейтинговой системе оценки знаний студентов и обеспечения качества учебного процесса» ФГБОУ ВО КНИТУ.

Рейтинговая оценка формируется на основании текущего и промежуточного контроля. За контрольные точки студент может получить минимальное и максимальное количество баллов (см. таблицу).

Оценочные средства	Кол-во	Мин.баллов	Макс.баллов
<b>14-й семестр</b>			
Реферат	1	8	12
Лабораторная работа	3	35	63
Контрольная работа	1	17	25
<b>Итого</b>		<b>60</b>	<b>100</b>

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

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

## 11. Информационно-методическое обеспечение дисциплины

### 11.1. Основная литература

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

Основные источники информации	Количество экземпляров
В. Г. Цирельсон, Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов [Электронный ресурс] учебное пособие для вузов: Москва : Лаборатория знаний, 2021	<a href="https://e.lanbook.com/book/172254">https://e.lanbook.com/book/172254</a> Режим доступа: по подписке КНИТУ
Е. Г. Газенаур, В. И. Крашенинин, Л. В. Кузьмина, Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Прочее] учебное пособие: Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012	<a href="http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=232678">http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=232678</a> Режим доступа: по подписке КНИТУ
Г.Г. Гарифзянова, Г.М. Храпковский, Катализ и механизмы химических реакций [Прочее] учеб. пособие: Казань : РИЦ "Школа", 2020	15 экз. УНИЦ ФГБОУ ВО «КНИТУ»

### 11.2. Дополнительная литература

В качестве дополнительных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу:

Дополнительные источники информации	Количество экземпляров
Р. . Назмутдинов, Молекулярные модели электрохимической межфазной границы: квантовая химия и компьютерный эксперимент [Автореферат] Автореф. дис...д-ра х.н. : 02.00.05-электрохимия: Казань : , 1998	1 экз. УНИЦ ФГБОУ ВО «КНИТУ»
Г.М. Храпковский, Г.Г. Гарифзянова, Изучение каталитических реакций с использованием квантово-химических методов [Электронный ресурс] методические указания к лабораторным работам: Казань : КНИТУ, 2013	<a href="http://ft.kstu.ru/ft/Garifzyanova-izuchenie.pdf">http://ft.kstu.ru/ft/Garifzyanova-izuchenie.pdf</a> Доступ с IP адресов КНИТУ
Г.Г. Гарифзянова, Р.В. Цышевский, Г.М. Храпковский, Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций	<a href="http://ft.kstu.ru/ft/kvantovo-him-raschety.pdf">http://ft.kstu.ru/ft/kvantovo-him-raschety.pdf</a> Доступ с IP адресов КНИТУ

[Электронный ресурс] учебно-методическое пособие: Казань : КНИТУ, 2012	
И. . Абаренков, А.В. Тулуб, В.Ф. Братцев, Начала квантовой химии [Учебник] учеб. пособие для ун-тов по спец. "Химия": М. : Высш. шк., 1989	2 экз. УНИЦ ФГБОУ ВО «КНИТУ»

### 11.3. Электронные источники информации

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

1. Электронный каталог УНИЦ КНИТУ: Режим доступа: <http://ruslan.kstu.ru/>
2. ЭБС «Лань»: Режим доступа: <https://e.lanbook.com>
3. Образовательная платформа «Юрайт»: Режим доступа: <https://urait.ru/>
4. ЭБС «Znanium.com»: Режим доступа: <http://znanium.com/>
5. ЭБС Университетская библиотека онлайн: Режим доступа: <http://biblioclub.ru/>
6. ЭБС IPRbooks: Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/>
7. ЭБС ВООК.ru : Режим доступа: <https://www.book.ru/>
8. Научная электронная библиотека <https://elibrary.ru/>
10. Сайт о химии [Электронный ресурс]: <http://www.xumuk.ru>.
11. Квантовая химия РХТУ. [Электронный ресурс]: <https://studfile.net/rhtu/416/>.
12. Журнал структурной химии. [Электронный ресурс]: <http://jsc.niic.nsc.ru>.
13. Популярная механика [Электронный ресурс]: <https://www.popmech.ru/>
14. Академик. [Электронный ресурс]: <http://www.dic.academic.ru>.
15. Курс квантовой химии [Электронный ресурс]: <https://onlearning.ru/kvantovaya-himiya/>

**УНИЦ**  
*Согласовано*

### 11.4. Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Базы данных

Scopus Доступ свободный: [www.scopus.com](http://www.scopus.com)

Web of Science Доступ свободный: [apps.webofknowledge.com](http://apps.webofknowledge.com)

Информационные справочные системы

Справочно-правовая система «ГАРАНТ» Доступ свободный: [www.garant.ru](http://www.garant.ru)

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс» Доступ свободный: [www.consultant.ru](http://www.consultant.ru)

## 12. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Лицензированное программное обеспечение и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства, используемое в учебном процессе при освоении дисциплины «Квантовая химия»:

Офисные и деловые программы: ABBYY FineReader 9.0 проф;

Офисные и деловые программы: MS Office 2007 Russian;

Офисные и деловые программы: MS Office 2007 Professional Russian;

Офисные и деловые программы: MS Office 2010-2016 Standard

Архиватор 7 Zip

Блокнот Notepad

Яндекс Браузер

Лицензированное программное обеспечение и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства, используемое в учебном процессе при освоении дисциплины «Квантовая химия»:

Категория ПО Наименование Лицензионный договор, соглашение

Офисные и деловые программы: ABBYY FineReader 9.0 проф от 19.11.2008 № AF90-3S1V01-102;  
Офисные и деловые программы: MS Office 2007 Russian от 16.10.2008 лицензия № 44684779;  
Офисные и деловые программы: MS Office 2007 Professional Russian от 16.10.2008 лицензия № 44684779;  
Офисные и деловые программы: MS Office 2010-2016 Standard от 08.11.2016 № 16/2189/Б;

Дополнительное ПО доступное по бесплатной подписке от Microsoft

Офисные и деловые программы: Microsoft Office 365 Версия для студентов  
Офисные и деловые программы: Microsoft Office 365 Версия для преподавателей  
ПО для коллективной работы Microsoft Teams

Научное ПО: Gaussian G09W Full Version от 22.12.2015 №15/2174/Б21.21э12.2015;  
Научное ПО: Gaussian G16W Full Version 18/2143/Б от 01.10.2018;  
Научное ПО: Gaussian G16l Full Version 18/2253/Б от 26.12.2018;  
Научное ПО: GaussView 6.0.16W 18/2252/Б от 26.12.2018;

Научное ПО: Mathcad Education  
Научное ПО: Mathematica Standard

Научное ПО: Aspen HYSYS (ANSYS Academic Research Mechanical and CFD; ANSYS LS-DYNA; ANSYS LS-DYNA HPC-8)  
Научное ПО: MATLAB Academic (в комплекте с Simulink Academic)

ПО имеющее лимит по сроку использования (закупленное ВУЗом)

Научное ПО: STATISTICA Academic До августа 2021  
Научное ПО: Hyperworks До декабря 2020

САПР: САПР CAD Assyst System  
САПР: КОМПАС-3D LT v12

ПО для перевода: ABBYY Lingvo x3 Английская версия от 19.11.2008 AL14 -1S1V05-102;  
ПО для перевода: ABBYY Lingvo x3 Европейская версия от 19.11.2008 AL14-2S1V05-102;

Дополнительное ПО доступное по бесплатной подписке от Microsoft

Офисные и деловые программы: Microsoft Office 365 Версия для студентов  
Офисные и деловые программы: Microsoft Office 365 Версия для преподавателей  
ПО для коллективной работы Microsoft Teams

Материально-техническое оснащение:  
Учебная мебель, столы, стулья.

Учебные аудитории для проведения учебных занятий оснащены оборудованием:  
1. комплект электронных презентаций/слайдов;  
2. аудитория, оснащенная презентационной техникой - проектор, экран, компьютер/ноутбук

техническими средствами обучения:

1. презентационная техника (проектор, экран, компьютер/ноутбук);
2. рабочие места бакалавров, оснащенные компьютерами с доступом в Интернет, предназначенные для работы в электронной образовательной среде

Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой: рабочие места бакалавров, оснащенные компьютерами с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечены доступом в электронную информационную среду КНИТУ.

### **13. Образовательные технологии**

В процессе освоения дисциплины «Квантовая химия» используются следующие образовательные технологии:

- работа в малых группах;
- изучение и закрепление нового материала на интерактивной лекции (лекция с разбором конкретных ситуаций);
- системы дистанционного обучения;
- метод кейсов.