


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  
« 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



Хаеримов 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



Китаева 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. ОК–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 спиновые 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:

$$R_{\text{т}} = R_{\text{пром}} + \Pi + К,$$

**-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>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>12</i>
<i>Реферат</i>	<i>1</i>	<i>5</i>	<i>12</i>
<i>Итоговый контроль</i>		<i>24</i>	<i>60</i>
<i>Итого:</i>		<i>60</i>	<i>100</i>

**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 <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996310982.html">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996310982.html</a> 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 <a href="https://e.lanbook.com/book/44352">https://e.lanbook.com/book/44352</a> . 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

<p>5. Грибов, Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул: Учебное пособие. —1. — Долгопрудный: Издательский дом "Интеллект", 2010. — 312 с.</p>	<p>ЭБС Znanium.com  <a href="http://znanium.com/go.php?id=193501">http://znanium.com/go.php?id=193501</a>  Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ</p>
--	--

<p>Долгопрудный: Издательский дом "Интеллект", 2010. — 312 с.</p>	<p>501  Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ</p>
<p>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.).</p>	<p>2 экз. в УНИЦ КНИТУ</p>

### 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» пересмотрена 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
	Протокол заседания кафедры № 1 от 04.09. 2018	Нет	Нет	