

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины**

**Квантовая химия**

Направление подготовки  
**04.03.01 Химия**

Квалификация (степень) выпускника  
**Бакалавр**

Форма обучения  
**очная**

Томск – 2015

### 1. Код и наименование дисциплины (модуля) Б1.В.ОД.3

Программа базовой дисциплины «Квантовая химия» составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО по направлению **04.03.01** – Химия, квалификация – Бакалавр.

### 2. Цель изучения дисциплины (модуля)

**Цель курса:** формирование у студентов химического факультета основных понятий, знаний и навыков квантовой химии, применение этих знаний для оценки общих и частных свойств атомов и молекул, основных физических причин образования и разрушения связей.

### 3. Год/годы и семестр/семестры обучения.

2 год, 4 семестр.

**4. Общая трудоемкость дисциплины (модуля)** составляет 4 зачетные единицы, 144 ч, из которых 76 ч составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (32 ч – занятия лекционного типа, 44 ч – занятия семинарского типа), 68 ч составляет самостоятельная работа обучающегося.

### 5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (разделу)
ОПК-1, I уровень	З (ОПК-1) – I <b>Знать</b> теоретические основы квантовой и методы механики квантовой химии, различные приближения при решении уравнения Шредингера для атомов и молекул У (ОПК-1) – I <b>Уметь</b> применять теоретические знания для решения конкретных задач в квантовой механике и квантовой химии

### 6. Содержание дисциплины (модуля) и структура учебных видов деятельности

#### 6.1. Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час)	Контактная работа (час)		Самостоятельная работа (час)
		Лекции	Практика	
Основные принципы квантовой механики	27	8	8	11
Собственные функции и собственные значения операторов физических величин. Принцип суперпозиций. Средние значения физических величин	27	6	10	11
Одномерное движение	22	6	7	9
Универсальная статическая модель структуры молекул	32	0	7	25
Системы тождественных частиц	36	12	12	12
Итого	144	32	44	68

## 6.2. Содержание дисциплины

1. **Становление квантовой механики. Теория и постулаты Бора.**
2. **Электрон – волна и частица.** Принцип Гамильтона. Формула плоской волны. Эксперименты поиска электронных оболочек. Принцип неопределенности. Интенсивность волны.
3. **Вероятностное рассмотрение электрона и микрочастиц.**
4. **Некоторые математические формулы и выражения.** Оператор. Свойства квантово-механических операторов. Спектры операторов. Собственные функции. Операторы координат. Оператор импульса. Оператор энергии. Произведение векторов. Момент импульса. Критерий возможности одновременного измерения двух физических величин на языке операторов. Коммутаторы операторов. Примеры коммутаторов, коммутационные соотношения. Математические ожидания. Средние значения. Законы сохранения и стационарные состояния.
5. **Поведение электрона в некоторых условиях.** Электрон в потенциальной яме. Электронное веретено. Спин. Момент орбитальный и момент собственный. Алгебра спинов. Магнитные моменты.
6. **Ситуация со множеством электронов.** Принцип тождественности микрочастиц. Оператор перестановки. Принцип антисимметрии. Что такое орбиталь? Детерминант Слетера. Метод Хартри–Фока.
7. **Орбитальная модель атома.** Квантовые числа. Скрытая симметрия водородного атома. Преобразование комплексных орбиталей в вещественные. Радиальные функции. Изовероятностные поверхности.
8. **Выбор и вид орбиталей.** Гибридные АО, электронные термы и конфигурации.
9. **Гибридизация при столкновениях атомных и молекулярных систем** (в случае воздействия внешних условий).
10. **Периодический закон и квантовая механика.** Построение электронных оболочек элементов. Периодичность состояний и других свойств.
11. **Молекулярная структура.**
12. **Модели молекулярных систем. Молекула водорода с позиций квантовой механики.**
13. **Интегралы S и H.**
14. **Водород по Гайтлеру и Лондону.** Локализованные связи в этилене.
15. **Бутадиен.**
16. **Порядок связи, индекс свободной валентности и распределение зарядов.**
17. **Универсальная статическая модель структуры молекул.**

## 6.3. Форма промежуточной аттестации – дифференцированный зачет.

### 7. Ресурсное обеспечение:

#### 7.1. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

##### 7.1.1. Рекомендуемая литература (основная)

1. *Унгер Ф. Г.* Квантовая механика и квантовая химия, или введение в спиновую химию: Курс лекций / Ф. Г. Унгер. – Томск, ТГУ: ТМЛ-Пресс, 2010. – 312 с.
2. *Ермаков А. И.* Квантовая механика и квантовая химия : учебник и практикум для академического бакалавриата / А. И. Ермаков. – М. : Изд-во Юрайт, 2016. – 555 с.
3. *Степанов Н. Ф.* Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 1 : учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Изд-во Юрайт, 2016. – 233 с.

4. *Степанов Н. Ф.* Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2 : учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Изд-во Юрайт, 2016. – 283 с.

### **7.1.2. Рекомендуемая литература (дополнительная)**

1. Строение атомных частиц. Водородоподобные атомы : [учебное пособие] / А. Я. Борщевский. – М. : Изд-во МГУ, 2010. – 86 с.

<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/borshevskii/1part.pdf>

2. Квантовая химия. Ч. 1. Квантовая механика и строение атома : Курс лекций для студентов 2 курса дневного отделения химического факультета / С. К. Игнатов. – Нижний Новгород : Изд-во Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского, 2013. – 115 с.

<http://www.unn.ru/chem/ignatov/IgnatovSK-KvantovayaKhimiya-1.pdf>

3. *Степанов Н. Ф.* Квантовая механика и квантовая химия : учеб. для вузов / Н. Ф. Степанов. – М. : Мир, 2001. – 519 с.

4. *Барановский В. И.* Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений / В. И. Барановский. – М. : Издательский центр «Академия», 2008. – 384 с.

### **7.1.3. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»**

1. Институт дистанционного образования, 2007. – URL: [http://ido.tsu.ru/iop\\_res2/kvantmeh/](http://ido.tsu.ru/iop_res2/kvantmeh/) (дата обращения: 01.10.2016)

2. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000. – URL: <http://elibrary.ru/>

3. Издательство «Юрайт» [Электронный ресурс] : электрон.-библиотечная система. – Электрон. дан. – М., 2013. – URL: <http://www.biblio-online.ru/>

### **7.2. Описание материально-технической базы**

Обучение дисциплине осуществляется с использованием лекционных аудиторий, оснащенных мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации, интерактивной доской (аудитории № 212 и № 311 6-го учебного корпуса ТГУ).

**8. Преподаватель, автор программы:** канд. хим. наук, доцент Л.В. Цыро