

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины

Квантовая химия и квантовая механика

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Магистерская программа

Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Квалификация (степень) выпускника

Магистр

Форма обучения

очная

1. Код и наименование дисциплины Б1.В.ОД.4 «Квантовая химия и квантовая механика»

2. Цель изучения дисциплины формирование у магистрантов знаний и навыков квантовой химии, применение этих знаний для оценки общих и частных свойств атомов и молекул, основных физических причин образования и разрушения связей и применения этих знаний на практике.

3. Год и семестр обучения: 1 год, 1 семестр.

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 часов, из которых 32 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (12 часа – занятия лекционного типа, 20 часов – занятия семинарского типа), 76 часов составляет самостоятельная работа обучающегося, в т.ч. подготовка к экзамену – 36 часов.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-2, I уровень Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	З (ПК-2) – I Знать возможности применения основных законов в научных исследованиях для получения новых результатов У (ПК-2) – I Уметь применять теоретические знания для решения конкретных задач в своей профессиональной деятельности

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час)	Контактная работа (час)		Самостоятельная работа (час)
		Лекции	Практические занятия	
Микрочастицы – объекты, образующие «поля»	8	2	2	4
Объекты, содержащие центры, образующие поля. Природа активности	8	2	2	4
Реальные системы с активными объектами	28	4	8	16
Модели водных нефтяных и других природных систем	28	4	8	16
Экзамен	36			36
Итого	108	12	20	76

6.2. Содержание дисциплины

1. Микрочастицы – объекты, образующие «поля»

1.1. Близкодействие и дальноедействие. Уравнения взаимодействия элементарных частиц. Единое уравнение потенциальной энергии взаимодействия между микрочастицами (уравнение единого «поля»).

1.2. Атомы.

1.3. Молекулы. Некоторые характеристики сил взаимодействия, выходящих за рамки валентной черты.

1.4. Макро- и мегамолекулы.

2. Объекты, содержащие центры, образующие поля. Природа активности.

2.1. Поверхность.

2.2. Особенности пористой и активноцентральной структуры поверхности.

2.3. Зарядовые и спиновые энергии и силы взаимодействия. Виды связи.

2.4. «Фантастические» силы взаимодействия, их место в едином уравнении поля.

3. Модели и реальные системы с активными объектами.

3.1. Модели адсорбентов с учетом зарядовых и спиновых сил.

3.2. Дискуссионные вопросы в понимании природы адсорбционных явлений.

3.3. Природные коллоидные системы гетеролитического и гомолитического типа.

3.4. «Блеск и нищета» коллоидной химии.

4. Модели водных нефтяных и других природных систем.

4.1. Водные системы.

4.2. Нефтяные и битумные системы.

4.3. Земля, горные породы и минералы. Цементы.

4.4. Биологические объекты.

4.5. Кристаллы.

4.6. Аморфные образования – наносистемы.

6.3. Форма промежуточной аттестации – экзамен.

7. Ресурсное обеспечение:

7.1. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

7.1.1. Рекомендуемая литература (основная)

1. Кук Д. Квантовая теория молекулярных систем. Единый подход / Д. Кук. – пер. Б. Новосадова. – М. : Изд-во Интеллект, 2012. – 256 с.

2. 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.

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

2. 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.

3. Родимов Б. Н. Автоколебательная квантовая механика / Б. Н. Родимов. – Томск: ТГУ, 1976. – 416 с.

4. 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.

5. Гааз А. Волны материи и квантовая механика / А. Гааз. – М.: КД Либроком, 2010. – 168 с.

7.1.3. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

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

2. Химический портал [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.himikatus.ru/index.php>

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

8. Автор: Цыро Лариса Васильевна, канд. хим. наук, доцент кафедры физической и коллоидной химии ХФ ТГУ.