

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета

А.С. Князев

« апреля 20 22 г.

Рабочая программа дисциплины

Квантовая химия и квантовая механика

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2021

Код дисциплины в учебном плане: Б1.О.В.02

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

А.С. Князев

Председатель УМК

В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-3.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля;

ИОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности;

ИОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить особенности основных методов расчета электронных характеристик различных систем

– Научиться использовать теоретические знания для решения конкретных задач в квантовой механике и квантовой химии в своей профессиональной деятельности

– Применять полученные знания для анализа и прогноза свойств различных материалов и систем

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, является обязательной для изучения.

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 3, экзамен.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Математический анализ, Физика, Вычислительные методы в химии, Линейная алгебра и аналитическая геометрия, Квантовая химия.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

– лекции: 12 ч.;

– практические занятия: 20 ч.

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Основные принципы квантовой механики

Основные положения квантовой механики.

Тема 2. Квантово-механическое описание молекулы

Приближение Борна-Оппенгеймера, Метод Хартри-Фока (ХФ) для молекул, Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана.

Тема 3. Основы метода функционала плотности

Метод функционала плотности. Приближение локальной плотности. Обобщенно-градиентное приближение.

Тема 4. Топологический анализ распределения электронной плотности

Основные понятия теории "Атомы в молекулах".

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, выполнения индивидуальных заданий и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

В 3 семестре проводится экзамен, состоящий из двух частей.

Первая часть включает выполнение индивидуальных заданий и написания контрольного теста на положительную оценку («отлично», «хорошо», «удовлетворительно») в рамках семинарских занятий.

Вторая часть представляет собой экзамен в устной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух теоретических вопросов. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Вопросы билетов проверяют освоение компетенций ОПК-3.

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». Оценка «отлично» ставится в случае полного, развернутого ответа на вопросы в билете и на дополнительные вопросы по предмету. Оценка «хорошо» ставится при полном, развернутом ответе на вопросы в билете и неполных ответах на дополнительные вопросы. Оценка «удовлетворительно» ставится в случае полного ответа на вопросы в билете и ответы на не все дополнительные вопросы. Оценка «удовлетворительно» ставится в случае отсутствия ответов на вопросы.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=22089>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Ефремов Ю. С. Квантовая механика : учебное пособие для вузов / Ю. С. Ефремов 2-е изд., испр. и доп.– М. : Изд-во Юрайт, 2018. – 458 с. - Университеты России.

–Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон. – 3-е изд., испр. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. – 495 с.

б) дополнительная литература:

– Майер И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул М. : БИНОМ. Лаб. знаний, 2006. – 384 с.

- Грибов Л. А., Баранов В. И. Теория и методы расчета молекулярных процессов: спектры, хим. превращения и молекуляр. логика. Москва [КомКнига], 2006. – 476 с.
- D. A. McQuarrie Quantum Chemistry / McQuarrie D. A. University Science Books; 2nd edition, 2016. – 518 p.

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
 - Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
 - публично доступные облачные технологии (GoogleDocs, Яндекс диск и т.п.).

- б) информационные справочные системы:
 - Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
 - Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
 - ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
 - ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
 - Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
 - ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
 - ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

- Аудитории для проведения занятий лекционного типа.
- Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.
- Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Меньщикова Татьяна Викторовна, канд. физ.-мат. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.