



Основная профессиональная образовательная программа
28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника
(Материалы микро- и наносистемной техники)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра фундаментальной и прикладной химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель ОП

(подпись) А.И. Александров

28 августа 2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Квантовая механика и квантовая химия

Уровень высшего образования:	бакалавриат
Квалификация выпускника:	бакалавр
Направление подготовки:	28.03.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника»
Направленность (профиль) образовательной программы:	Материалы микро- и наносистемной техники

Иваново



1. Цели освоения дисциплины

Целями дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» являются:

- формирование представлений о современной теоретической химии;
- приобретение знаний, умений и навыков для исследования свойств молекулярных систем и решения теоретических задач химии.

Задачами дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» являются:

- раскрыть понятийный аппарат квантовой химии;
- сформировать представления об основах теории строения атомов и молекул, о схемах решения уравнения Шредингера для атомов и молекул;
- сформировать начальные навыки практического использования компьютерных программ для решения задач теоретической химии;
- сформировать начальные навыки практического использования квантово-химических программ для описания свойств атомов и молекул.
- сформировать умения анализировать результаты компьютерного эксперимента.

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина является обязательной дисциплиной; относится к части, формируемой участниками образовательных отношений

Успешное освоение данной дисциплины будет способствовать готовности студентов к освоению дисциплин: «Методы анализа и контроля наноструктурированных материалов», «Компьютерное моделирование наносистем», «Органические пленки и монослои», «Физика жидких кристаллов», прохождению практики «Научно-исследовательская работа», выполнению ВКР.

Студент, приступающий к изучению дисциплины, должен обладать знаниями, умениями, навыками, полученными ранее в ходе изучения дисциплин: «Математика», «Физика», «Химия».

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

знать:

- основные законы естественнонаучных дисциплин: математики (алгебра, геометрия, математический анализ, высшая математика), физики (классическая и волновая механика, атомная физика), общей химии.

уметь:

- работать с компьютером на уровне пользователя;
- решать математические задачи;
- применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов.

Иметь: практический опыт/Иметь навыки:

- первичные навыки решения математических и прикладных задач.

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее:

«Методы анализа и контроля наноструктурированных материалов», «Компьютерное моделирование наносистем», «Органические пленки и монослои», «Физика жидких кристаллов», практика «Научно-исследовательская работа», выполнение ВКР.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1. Компетенции, формированию которых способствует дисциплина

При освоении дисциплины формируются следующие компетенции в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

а) УК-1. Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач



Основная профессиональная образовательная программа
28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника
(Материалы микро- и наносистемной техники)

в) ПК-1. Способен осуществлять профессиональную деятельность с учетом знаний теоретических и прикладных основ материаловедения, микромеханики и сопромата

3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения формируемых компетенций

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать: - основы квантовой механики и квантовой химии УК-1,

- основные концепции и способы квантово-химических расчетов ПК-1.

Уметь: - работать с компьютером на уровне пользователя и применять законы квантовой механики для описания электронных свойств атомов и молекул УК-1, ПК-1,

- выполнять квантово-химические расчеты электронного строения простых молекул с помощью современных программ и выполнять анализ результатов расчетов, включающий рассмотрение диаграмм МО, энергии ионизации молекулы, зарядов на атомах, дипольных моментов ПК-1;

- применять основные законы химии при обсуждении полученных математических расчетов и результатов компьютерного моделирования УК-1, ПК-1.

Иметь практический опыт/Иметь навыки:

- использования основных законов квантовой механики и квантовой химии при решении профессиональных задач и обсуждении полученных результатов УК-1, ПК-1.,

- навыками работы с программой для квантово-химических расчетов и навыками выполнения анализа результатов расчета по выходному файлу, а также навыками сравнительного анализа электронных и геометрических характеристик молекул УК-1, ПК-1.

4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 3 зачетных единицы (108 академических часов).

4.1. Содержание дисциплины по разделам (темам), соотнесенное с видами и трудоемкостью занятий лекционно-семинарского типа

Объем иной контактной работы и самостоятельной работы обучающегося по дисциплине указан в учебном плане образовательной программы.

№ п/п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем (в ак. часах, по очной/заочной форме обучения)		Формы текущего контроля успеваемости (по очной/заочной форме обучения) Формы промежуточной аттестации
			Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	
1.	Описание состояния системы в квантовой механике. Водородоподобные атомы.	6	6	6	Отчеты по практическим работам (2).
2.	Многочастичные атомы. Приближенные методы решения квантово механических задач.	6	6	6	Отчеты по практическим работам (2).
3	Теория химической связи. Одноэлектронная молекула H_2^+ . Метод МО-ЛКАО.	6	4	4	Отчеты по практическим работам (2).



Основная профессиональная образовательная программа
28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника
(Материалы микро- и наносистемной техники)

4	Многоэлектронные молекулы. Методы решения электронного волнового уравнения для многоэлектронных молекул.	6	6	6	Отчеты по практическим работам (2).
5	Геометрическое строение многоатомных молекул. Геометрические параметры. Методы определения геометрического строения молекул.	6	4	4	Отчеты по практическим работам (2).
6	Жесткие и нежесткие молекулы.	6	4	4	Отчеты по практическим работам (2).
7	Строение фуллеренов и нанотрубок.	6	4	4	Отчеты по практическим работам (2). Отчет по зачетному заданию
ИТОГО:			34	34	

4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)

1. Водородоподобные атомы.

Оператор Гамильтона. Граничные условия и квантовые числа. Потенциальная и полная энергия электрона в атоме водорода. Уровни энергии и спектр водородоподобного атома. Вектор орбитального момента количества движения электрона. Проекция вектора МКД на ось внешнего поля. Волновые функции. Радиальные и угловые составляющие АО, их анализ, графики функций. Проникающие и непроникающие АО. Спин электрона. Полные волновые функции электрона. 6.

2. Многоэлектронные атомы.

Приближенные методы решения квантово-механических задач.

Оператор кинетической и потенциальной энергий для многоэлектронного атома. Оператор Гамильтона. Метод Хартри. Одноэлектронное приближение. Эффективное поле для i -того электрона в атоме. Энергия АО. Остовные и кулоновские интегралы. Полная энергия электронов в атоме.

Метод самосогласованного поля на примере двух электронного атома. Принцип Паули и определители Слетера. Запрет Паули. Требования, предъявляемые к волновым функциям многоэлектронных систем.

Метод Хартри-Фока. Остовные, кулоновские и обменные интегралы. Полная энергия электронов в атоме, энергия АО в методе ХФ. Приближенные аналитические функции АО. Радиальные и угловые составляющие АО в многоэлектронных атомах. Атомные орбитали Слетера-Зинера. Гауссовы функции. Эффект экранирования электронов в многоэлектронном атоме. Константа экранирования. Эффективный заряд ядра. Правила для вычисления константы экранирования. Оценка размеров и энергий АО в многоэлектронных атомах.

Электронные конфигурации многоэлектронных атомов.. Электронные уровни, подуровни, АО и спин-АО. Периодическая система элементов и квантовая механика атомов. Потенциал ионизации, сродство к электрону, размеры атомов, валентные АО. Изменения свойств атомов вдоль рядов и периодов ПС.

3. Теория химической связи.

Одноэлектронная молекула H_2^+ . Уравнение Шредингера для молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Принцип Борна-Оппенгеймера. Гамильтониан для молекулярного иона H_2^+ .



Основная профессиональная образовательная программа
28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника
(Материалы микро- и наносистемной техники)

Метод молекулярных орбиталей. Приближение МО-ЛКАО. Требования, предъявляемые к комбинируемому АО.

Расчет энергии и волновой функции иона H_2^+ . Кулоновский, обменный интегралы, интеграл перекрывания, их зависимость от расстояния между ядрами. Энергии и волновые функции основного и первого возбужденного состояния иона H_2^+ . Классификация МО двухатомных молекул. Связывающие, разрыхляющие и несвязывающие МО. Симметрия МО, σ -, π - и δ -МО.

Многоэлектронные молекулы. Методы решения электронного волнового уравнения для многоэлектронных молекул. Метод молекулярных орбиталей. Одноэлектронные спин-МО. Многоэлектронная волновая функция. Полная энергия электронов в молекуле. Вариационный принцип Ритца. Уравнения Рутаана. Вековое уравнение и вековой определитель. Схема процесса самосогласования в методе Хартри-Фока-Рутаана.

4. Корреляционные диаграммы для гомо- и гетероядерных двухатомных молекул. Определение свойств молекул с помощью метода МО.

Метод МО для многоэлектронных гомоядерных двухатомных молекул. Построение МО. Последовательность МО для молекул от Li_2 до Ne_2 .

Гетероядерные двухатомные молекулы. Молекулы HF, LiH, PF и др. Диаграммы МО. Распределение электронной плотности, заряды на атомах в молекуле, дипольный момент. Полярность химической связи. Различные типы диаграмм МО (s-s, s-p, p-p). Связь между коэффициентами при АО на МО и качественными предсказаниями о полярности химической связи.

5. Геометрическое строение многоатомных молекул. Геометрические параметры. Методы определения геометрического строения молекул. Геометрические параметры. Ковалентные и вандерваальсовы радиусы. Оценка величин длин связей.

Теория отталкивания электронных пар валентной оболочки для молекул, имеющих один центральный атом (примеры молекул AX_2E , AX_2E_2 , AX_5 , AX_3E_2 , AX_6 , AX_3), для молекул органических соединений.

Гибридизация АО и ТООЭПВО

6. Жесткие и нежесткие молекулы. Поверхность потенциальной энергии. Примеры структурной нежесткости. Потенциальная функция внутреннего вращения молекулы C_2H_6 . Барьер внутреннего вращения. Примеры конформаций в различных молекулах.

7. Геометрическое и электронное строение полиароматических соединений. Правило Хюккеля.

8. Строение фуллеренов и нанотрубок.

9. Высокмолекулярные соединения. Полимер и мономер. Реакция полимеризации. Реакция поликонденсации. Стереорегулярные неупорядочные структуры полимера.

5. Образовательные технологии

Лекции: проводятся в оборудованном компьютером и проектором классе в классическом варианте и в виде лекций-презентаций в Microsoft Office PowerPoint.

Практические занятия: **Активно-деятельный подход** к обучению студентов по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» реализуется в индивидуальном выполнении практических заданий, по тематике совпадающей с материалом лекций. Все практические задания выполняются с использованием РС. Отчеты выполняются студентами как в электронном виде, так и письменном виде.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся



Основная профессиональная образовательная программа
28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника
(Материалы микро- и наносистемной техники)

При самостоятельной работе (СРС) студентам предлагается использовать материалы лекций, литературу из доступных электронно-библиотечных систем и различных электронных ресурсов. Текущая и опережающая СРС, направленная на углубление и закрепление знаний, а также развитие практических умений заключается в:

- работе студентов с лекционным материалом, поиск и анализ литературы и электронных источников информации по заданной проблеме;
- подготовке отчетов к практическим работам в соответствии с требованиями.
- подготовке к зачету.

Методический материал по обеспечению самостоятельной работы студентов приводится в приложении 1 к РП.

7. Характеристика оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

В качестве оценочных средств для проведения текущего контроля выступают: Требования к представлению отчетов по практическим работам. Вопросы к зачету.

Типовые варианты вопросов и заданий находятся в приложении к РП в разделе «Фонд оценочных средств».

В качестве оценочных средств для проведения текущего контроля выступают: Требования к представлению отчетов по практическим работам.

В качестве итогового контроля используется отчет в виде презентации, в которой представлены результаты зачетного задания.

Критерии и шкала оценки:

- оценка «зачет» выставляется студенту при наличии отчетов по практическим работам и выступлению с презентацией результатов зачетного задания.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная учебная литература:

1. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] : Учебное пособие / Барановский В.И. - М.: Академия, 2008. – 384 с. Режим доступа : <http://www.kinetics.nsc.ru/chichinin/books/spectroscopy/baranovskii08.pdf> (дата обращения 30.11.2015).
2. Боженко, К. В. Основы квантовой химии [Электронный ресурс] : конспект лекций / К. В. Боженко. - М.: Российский университет дружбы народов, 2010. - 126 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=115718> (дата обращения 30.11.2015).
3. Ведринский Р.В. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебник / Ведринский Р.В. – Ростов н/Д: ЮФУ, 2009 – 384 с. Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view&book_id=240937 (дата обращения 30.11.2015).
4. Ефремов Ю.С. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ефремов Ю.С. – М.-Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 457 с. Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view&book_id=273446 (дата обращения 30.11.2015).
5. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] : учебное пособие / Крашенинин В.И. , Газенаур Е.Г. , Кузьмина Л.В. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view&book_id=232678 (дата обращения 30.11.2015).
6. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Учебное пособие для вузов [Электронный ресурс] / В. Г. Цирельсон. - : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 521 с. Режим доступа:



Основная профессиональная образовательная программа
20.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника
(Материалы микро- и наносистемной техники)

<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=214187> (дата обращения 30.11.2015).

Дополнительная учебная литература:

1. Белова Н.В. Симметрия молекул. Операции и элементы симметрии. Точечные группы. / Белова Н.В., Гиричева Н.И. – Иваново: Иван. гос. хим.-технолог. ун-т, 2013. – 48 с.
2. Грибов Л.А. Теория и методы расчёта молекулярных процессов: спектры, химические превращения и молекулярная логика / Грибов Л.А., Баранов В.И. – М.: «КомКнига», 2006. – 480 с.
3. Грибов Л.А. Квантовая химия. Учебник для студентов химических и биологических специальностей ВУЗ-ов / Грибов Л.А., Муштакова С.П. – М.: Гардарики, 1999 – 387 с.
4. Краснов, К. С. Молекулы и химическая связь : учеб. пособие для хим.-технол. спец. вузов / К. С. Краснов. - М.: Высш. шк., 1977. - 280 с.
5. Маррел Дж. Химическая связь / Маррел Дж., Кеттл С., Теддер Дж. – М.: Мир, 1980. – 387 с.
6. Минкин В.И. Теория строения молекул / Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. - Ростов н/Д: Феникс, 1997. – 560 с.
7. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия / Степанов Н.Ф. - М.: "МИР", Изд. Московского ун-та, 2001.- 519 с.
8. Холанд А. Молекулы и модели: Молекулярная структура соединений элементов главных групп. Пер. с англ. / Холанд А.– М.: УРСС: КРАСАНД, 2011. – 384 с.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет»
<https://uni.ivanovo.ac.ru>

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» www.biblioclub.ru;
<http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/polnotekstovye-resursy/ebs-universitetskaya-biblioteka>
Электронная библиотека ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/polnotekstovye-resursy/elibnew>

Электронный каталог НБ ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/ek>

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office и(или) LibreOffice, интернет-браузер Microsoft Edge и(или) Yandex Browser.

- Программа Origin для построения графиков функций и выполнения МНК-анализа.
- Программа для расчета геометрических и электронных характеристик молекул HyperChem.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории:

— для проведения занятий лекционного типа с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения, служащими для предоставления учебной информации большой аудитории;

— для проведения занятий семинарского типа, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, выполнения курсовых работ (проектов) с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения.



Основная профессиональная образовательная программа
28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника
(Материалы микро- и наносистемной техники)

Лаборатория, оснащенная лабораторным оборудованием, комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения.

Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом специализированной учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в ЭИОС.

Демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия для занятий лекционного типа, обеспечивающие тематические иллюстрации: персональный компьютер, проектор, экран

Автор рабочей программы дисциплины: профессор кафедры фундаментальной и прикладной химии, доктор химических наук, профессор Гиричева Н.И.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры фундаментальной и прикладной химии 28 августа 2024 г., протокол № 1

Приложение 1. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины
Приложение 2. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине.