

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 05 04-2021, ОСВО 1-31 05 02-2021, типовых учебных планов №G31-1-019/пр.-тип и G31-01-017/пр.-тип., утвержденных 31.03.2021 г., учебных планов G31-1-010/уч. G31-1-008/уч., утвержденных 25.05.2021 г.

СОСТАВИТЕЛИ:

А. Н. Рябцев, доцент кафедры органической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент;

Вадим Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук;

Виталий Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук.

РЕЦЕНЗЕНТ:

Ю.В. Григорьев, заведующий лабораторией химии конденсированных сред Учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», кандидат химических наук

А.И. Кулак, директор Государственного научного учреждения «Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук Беларуси», член-корреспондент НАН Беларуси, доктор химических наук, профессор

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии
(протокол № 5 от 4 декабря 2023 г.).

Научно-методическим Советом БГУ
(протокол № 4 от 21.12.2023г.)

Зав.кафедрой _____



Свиридов Д.В.

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе
и образовательным инновациям

_____ О.Г. Прохоренко

«22» декабря 2023 г.

Регистрационный № УД- 12640 /уч.

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:**

1-31 05 02 Химия лекарственных соединений

1-31 05 04 Фундаментальная химия

2023 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 05 04-2021, ОСВО 1-31 05 02-2021, типовых учебных планов №G31-1-019/пр.-тип и G31-01-017/пр.-тип., утвержденных 31.03.2021 г., учебных планов G31-1-010/уч. G31-1-008/уч., утвержденных 25.05.2021 г.

СОСТАВИТЕЛИ:

А. Н. Рябцев, доцент кафедры органической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент;

Вадим Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук;

Виталий Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук.

РЕЦЕНЗЕНТ:

Ю.В. Григорьев, заведующий лабораторией химии конденсированных сред Учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», кандидат химических наук

А.И. Кулак, директор Государственного научного учреждения «Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук Беларуси», член-корреспондент НАН Беларуси, доктор химических наук, профессор

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии
(протокол № 5 от 4 декабря 2023 г.).

Научно-методическим Советом БГУ
(протокол № 4 от 21.12.2023г.)

Зав.кафедрой _____ Свиридов Д.В.

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цель учебной дисциплины – дать студентам представление о квантово-механических подходах к теории химической связи, об основных методах расчета атомных и молекулярных систем, а также об основных областях применения квантовой химии.

Задачи учебной дисциплины – знакомство студентов с основами квантовой теории, математическим аппаратом квантовой механики, формирование у студентов критического понимания возможностей и ограничений квантово-химических методов. От студента требуется не только усвоение общих идей и принципов квантовой механики, но и их активное применение при решении задач.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием.

Учебная дисциплина «Квантовая химия» для специальности 1-31 05 04 Фундаментальная химия входит в модуль «Строение вещества» государственного компонента. Учебная дисциплина «Квантовая химия» для специальности 1-31 05 02 Химия лекарственных соединений входит в модуль «Строение вещества» компонента учреждения образования.

Дисциплина «Квантовая химия» является одним из разделов физической химии, который включает в себя теоретические основы других разделов химии - неорганической, аналитической и органической и, вследствие этого, был выделен как самостоятельная дисциплина.

Дисциплина может быть прочитана после изучения дисциплины «Неорганическая химия».

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Квантовая химия» для студентов специальности 1-31 05 04 Фундаментальная химия должно обеспечить формирование следующих компетенций:

БПК-11: Использовать понятийно-категориальный аппарат современной теории химического строения, включающий описание квантовых состояний молекул, симметрии молекулярных систем, строение конденсированных фаз (жидкостей, аморфных веществ, мезофаз, кристаллов) для описания их электрических, магнитных и оптических свойств.

Освоение учебной дисциплины «Квантовая химия» для студентов специальности 1-31 05 02 Химия лекарственных соединений должно обеспечить формирование следующих компетенций:

СК-6: Ориентироваться в современной теории химического строения, включающей квантовые состояния молекул, симметрию молекулярных систем, их электрические, магнитные и оптические свойства, в строении и структурной организации конденсированных фаз (жидкостей, аморфных веществ, мезофаз, кристаллов).

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- основные постулаты квантовой механики;
- принципы квантово-механического описания многоэлектронных систем (атомов и молекул);
- природу химической связи и факторы, влияющие на ее прочность;
- о квантованных вращательных, колебательных и электронных состояниях молекул и их относительных энергиях как источниках информации о молекулярной структуре.

уметь:

- решать простейшие типовые задачи на базе соответствующих разделов курса;
- строить диаграммы орбитальных энергий для простейших молекул и условные изображения атомных и молекулярных орбиталей;

владеть:

- методологией расчета длины связей, валентных углов, энергий диссоциации для двухатомных молекул из вращательных и колебательных спектров;
- представлениями о современных методах расчета энергий и структурных параметров молекул.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 6 семестре. Всего на изучение учебной дисциплины «Квантовая химия» отведено 102 часа, в том числе 52 аудиторных часа, из них: лекции – 28 часов (из них 6 часов ДОТ), лабораторные занятия – 18 часов (из них 12 часов ДОТ), управляемая самостоятельная работа – 6 часов (из них 2 часа ДОТ).

Форма получения высшего образования – очная.

Форма промежуточной аттестации – зачет.

Количество зачетных единиц – 3.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Тема 1. ВВЕДЕНИЕ

Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции развития квантовой химии как основного теоретического фундамента современной химической науки. Решение прикладных задач с использованием методов квантовой химии. Перспективы развития квантовой химии.

Тема 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ОСНОВНЫЕ ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Основные постулаты квантовой механики. Волновые функции и их свойства. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве.

Математический аппарат квантовой механики. Операторы физических величин и их свойства. Операторы координат, импульсов, моментов импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Матричное представление операторов. Собственные функции и собственные значения. Разложение по собственным функциям эрмитова оператора. Среднее значение физической величины.

Коммутационные соотношения операторов. Соотношения неопределенностей, физический смысл и простейшие оценки на их основе. Уравнение Шредингера. Временное и стационарное уравнения Шредингера. Дискретный и непрерывный спектры.

Тема 3. МОДЕЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками и в трехмерном потенциальном ящике. Вырождение. Модель свободных электронов для сопряженных полиенов. Спектры сопряженных систем.

Гармонический осциллятор. Энергетические состояния и волновые функции.

Жесткий ротатор. Энергетические состояния и волновые функции.

Тема 4. ВОДОРОДОПОДОБНЫЙ АТОМ

Задача об атоме водорода. Разделение переменных. Атомные орбитали. Квантовые числа. Графическое представление радиальных и угловых частей. Функции радиального распределения. Энергетические состояния атома водорода. Вырождение одноэлектронных состояний как следствие симметрии центрального поля.

Тема 5. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие и при наличии вырождения. Применение теории возмущений для расчета энергии атома водорода в однородном электрическом поле. Вариационный принцип.

Тема 6. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

Системы тождественных частиц. Одноэлектронное приближение. Спин элементарных частиц. Операторы спина, их коммутационные соотношения, собственные значения, собственные функции. Магнитный момент, связанный со спином. Антисимметричность волновой функции для системы электронов (принцип Паули). Представление волновой функции системы электронов в виде определителя. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока для атомов. Орбитальные энергии и их связь с полной энергией. Теорема Купманса. Недостатки метода Хартри-Фока. Понятие об электронной корреляции. Орбитали Слэтера.

Теория момента импульса. Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса. Сложение моментов для атомов.

Атом гелия. Синглетные и триплетные состояния.

Электронное строение и состояния многоэлектронных атомов. Спин-орбитальное взаимодействие. Термы состояний атомов по схеме Расселла-Саундерса. Спектры атомов щелочных и щелочноземельных элементов. Нормальный и аномальный эффекты Зеемана в атомной спектроскопии. Эффект Пашена-Бака.

Тема 7. ПОВЕРХНОСТЬ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ. ДВУХАТОМНЫЕ МОЛЕКУЛЫ

Уравнение Шредингера для молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Равновесная ядерная конфигурация. Поверхность потенциальной энергии. Полная энергия. Энергия нулевых колебаний (ZPVE). Энергия при 0 К.

Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (LCAO). Вариационный метод Ритца. Понятия о кулоновском и резонансном интеграле и интеграле перекрывания. Задача о молекулярном ионе водорода. Электронное строение гомоядерных двухатомных молекул. Связывающие и разрыхляющие орбитали, σ - и π -орбитали. Несвязывающие орбитали. Корреляционные диаграммы МО для двухатомных молекул.

Тема 8. РАСЧЕТНЫЕ МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Стандартные базисные наборы гауссовских функций. STO-NG, K-LMG, базисные наборы с поляризационными и диффузными функциями, базисные наборы с эффективным потенциалом. Уравнения Рутаана. Характеристика базисных наборов. Сравнительный анализ возможностей различных методов. Проблема выбора уровня теории при проведении квантовохимического исследования.

Тема 9. МЕТОД ХЮККЕЛЯ

Метод Хюккеля для сопряженных систем. Линейные сопряженные полиены. Циклические полиены. Ароматичность и правило $4n+2$. Порядки связей, π -электронные плотности и индексы свободной валентности. Метод Хюккеля для систем с гетероатомами.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Дневная форма получения образования с применением дистанционных образовательных технологий

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСП	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	Введение	2						
2	Математический аппарат квантовой механики. Основные постулаты квантовой механики	4 2 (ДОТ)			2			собеседование
3	Модельные задачи квантовой механики	6			4 (ДОТ)		2	тест, контрольная работа
4	Водородоподобный атом	2			2		2 (ДОТ)	тест, контрольная работа
5	Приближенные методы решения квантовомеханических задач	2			2 (ДОТ)			тест
6	Многоэлектронные атомы	4			2 (ДОТ)			тест, контрольная работа
7	Поверхность потенциальной энергии. Двухатомные молекулы	2 (ДОТ)			2			собеседование
8	Расчетные методы квантовой химии	4 2 (ДОТ)			2 (ДОТ)		2	тест, контрольная работа
9	Метод Хюккеля для сопряженных систем	2			2 (ДОТ)			тест
	Итого	28			18		6	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы

1. Барановский В.И., Квантовая механика и квантовая химия. Лань, 2019.
2. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: «Феникс», 1997.
3. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001.
4. Фларри Р. Квантовая Химия. М.: Мир, 1985.
5. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.: Лаборатория знаний, 2021.
6. Эткинс П. Физическая химия, т. 1,2. М.: Мир, 1982.

Перечень дополнительной литературы

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. М.: Мир, 2001.
2. Грибов Л.А., Муштакова С.П. Квантовая химия. М.: Мир, 1999.
3. Матулис Вадим Э., Матулис Виталий Э., Ивашкевич О.А. Прикладная квантовая химия: учебное пособие. Минск: БГУ, 2007.
4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. М.: Химия, 1986.
5. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Учебным планом по специальностям 1-31 05 02 Химия лекарственных соединений и 1-31 05 04 Фундаментальная химия, в качестве формы промежуточной аттестации по учебной дисциплине «Квантовая химия» рекомендован зачет.

Для текущей оценки достижений и контроля качества усвоения знаний студентами используется следующий диагностический инструментарий:

- выполнение тестовых заданий;
- письменные контрольные работы по отдельным темам;
- собеседование по отдельным темам;
- сдача зачета по учебной дисциплине.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

Тема: Модельные задачи квантовой механики (2 часа)

Задание 1. Выполнить расчеты электронных спектров сопряженных полиенов.

Задание 2. Выполнить расчеты и анализ электронных спектров ароматических углеводородов (бензол, нафталин, антрацен и т.д.).

Перечень средств диагностики:

1. Контрольная работа.
2. Тест на СДО.
3. Итоговая контрольная работа.

Тема: Водородоподобный атом (2 часа)

Задание 1. Построить контурные карты АО.

Задание 2. Выполнить анализ распределения электронной плотности для различных электронных состояний водородоподобного атома.

Перечень средств диагностики:

1. Контрольная работа.
2. Итоговая контрольная работа.

Тема: Расчетные методы квантовой химии (2 часа)

Задание. Исследовать влияние базисного набора на точность расчета свойств молекулярных систем.

Перечень средств диагностики:

1. Тест на СДО.
2. Итоговая контрольная работа.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используются *эвристический и практико-ориентированный подходы*, которые предполагают:

- демонстрацию многообразия решений профессиональных задач;
- индивидуализацию обучения через возможность самостоятельно ставить цели, осуществлять рефлексию собственной образовательной деятельности;
- освоение содержания образования через решения практических задач.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

При изучении учебной дисциплины рекомендуется использовать следующие формы самостоятельной работы:

поиск и обзор литературы и электронных источников по заданной проблеме курса;

выполнение домашнего задания;

решение задач, предлагаемых на практических занятиях;
подготовка к практическим семинарским занятиям; – научно-исследовательские работы;
составление моделей и проведение расчетов.

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Волновая функция, операторы в квантовой механике.
2. Собственные функции и собственные значения.
3. Уравнение Шредингера, среднее значение физической величины.
4. Принцип суперпозиции. Соотношения неопределенностей.
5. Частица в одномерном потенциальном ящике.
6. Частица в трехмерном потенциальном ящике.
7. Спектры сопряженных систем.
8. Гармонический осциллятор.
9. Колебания и колебательные спектры молекул.
10. Жесткий ротатор.
11. Микроволновые спектры линейных молекул.
12. Атом водорода. Атомные орбитали. Графическое представление радиальных и угловых частей.
13. Магнитные моменты атома. Спин электрона.
14. Многоэлектронные атомы. Полная волновая функция многоэлектронного атома.
15. Полные орбитальные и спиновые квантовые числа многоэлектронного атома. Термы атомов.
16. Уравнение Шредингера для молекул.
17. Поверхность потенциальной энергии. Полная энергия. Энергия нулевых колебаний (ZPVE). Энергия при 0 К.
18. Метод Хартри-Фока.
19. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (LCAO).
20. Уравнения Рутаана.
21. Характеристика базисных наборов.
22. Качественная теория МО для двухатомных гомоядерных молекул.
23. Метод Хюккеля для сопряженных систем.
24. Циклические полиены. Ароматичность и правило $4n+2$.
25. Согласованные реакции.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Кристаллохимия	Кафедра неорганической химии	Нет	протокол № 5 от 4 декабря 2023 г.
Физические методы исследования	Кафедра неорганической химии	Нет	протокол № 5 от 4 декабря 2023 г.

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ ПО
ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 20_ г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
