

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Д.А. Таюрский

» _____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Общие основы квантовой химии

Направление подготовки: 44.03.01 - Педагогическое образование

Профиль подготовки: Химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2019

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) Камалеева А.Р.

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1	Способен использовать знания теоретических основ фундаментальных разделов химии в профессиональной деятельности
УК-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

Основные положения квантовой механики, основы современной теории химического строения молекул, виды химической связи, строение многоатомных молекул

Должен уметь:

Строить энергетические диаграммы МО ЛКАО и модели электронного строения атомов и молекул, решать модельные задачи квантовой химии

Должен владеть:

навыками по определению гибридизации орбиталей химических веществ

Должен продемонстрировать способность и готовность:

к обучению учащихся школ к освоению строения вещества

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.04.02 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 44.03.01 "Педагогическое образование (Химия)" и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 2 курсе в 3 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) на 108 часа(ов).

Контактная работа - 36 часа(ов), в том числе лекции - 18 часа(ов), практические занятия - 0 часа(ов), лабораторные работы - 18 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 72 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 3 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Основы современной теории химического строения	3	2	0	2	8

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Качественное рассмотрение спектроскопии молекул	3	2	0	2	8
3.	Тема 3. Квантовые числа. Периодическая система элементов	3	2	0	2	8
4.	Тема 4. Квантовые числа. Периодическая система элементов	3	2	0	2	8
5.	Тема 5. Электронные и инфракрасные спектры многоатомных молекул	3	2	0	2	8
6.	Тема 6. Математический аппарат квантовой. Радиальное уравнение Шредингера. Атом H	3	2	0	2	8
7.	Тема 7. Метод молекулярных орбиталей МО ЛКАО. Методы функционала плотности, полуэмпирические, неэмпирические методы решения электронного уравнения Шредингера для многоатомных молекул	3	2	0	2	8
8.	Тема 8. Поверхность потенциальной энергии, её свойства и расчеты	3	2	0	2	8
9.	Тема 9. Химическая связь и теория Бейдера	3	2	0	2	8
	Итого		18	0	18	72

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Основы современной теории химического строения

Предмет и задачи квантовой химии. Краткая история. Микро- и макроскопические характеристики. Взаимосвязь квантовой химии со статистической физикой и термодинамикой. Источники света: 1) температурные излучатели, 2) люминесцентные источники света, 3) свечение среды. Электролюминесценция. Катодолюминесценция. Хемилюминесценция.

Тема 2. Качественное рассмотрение спектроскопии молекул

Взаимодействие электромагнитного излучения с молекулами - основной источник информации об их строении. Области электромагнитного излучения и единицы измерения, применяемые в молекулярной спектроскопии. Свечение среды - фотолюминесценция, флюоресценция, фосфоресценция. Вилы спектров. Спектральный анализ.

Тема 3. Квантовые числа. Периодическая система элементов

Основные характеристики спектра: длина волны (энергия перехода) и интенсивность (вероятность перехода). Спектр атома водорода: серии Лаймана, Бальмера и Пашена. Основное квантовое число. Спектры излучения: сплошной (непрерывный) спектр, линейчатый спектр, полосатый спектр. Спектр поглощения. Закон Кирхгофа.

Тема 4. Квантовые числа. Периодическая система элементов

Рентгеновские лучи. Интерференция атомных орбиталей, электронная делокализация и обмен. Теория молекулярных орбиталей (МО) химической связи: связывающие, антисвязывающие (разрыхляющие) и несвязывающие орбитали. Молекулы H_2 и He_2^+ : порядок связи и мультиплетность. Антисимметричность волновой функции.

Тема 5. Электронные и инфракрасные спектры многоатомных молекул

Электронные спектры в видимой и ближней ультрафиолетовой области электромагнитного спектра и переходы одного валентного электрона. Классификация электронных состояний: синглетные и триплетные возбужденные состояния. Спектры поглощения и люминесценции.

Интерпретация и классификация электронных спектров многоатомных молекул с их связь с электронным строением молекул. Инфракрасные (ИК) спектры молекул, число колебательных степеней свободы. Нормальные координаты и нормальные колебания. Форма и симметрия нормальных колебаний. Частоты характеристических колебаний.

Тема 6. Математический аппарат квантовой. Радиальное уравнение Шредингера. Атом Н

Операторное исчисление. Линейные самосопряженные операторы. Операторы потенциальной энергии, проекции момента импульса и кинетической энергии. Собственные значения и собственные функции линейного самосопряженного оператора. Волновые функции, на которых определены линейные самосопряженные операторы и их свойства.

Тема 7. Метод молекулярных орбиталей МО ЛКАО. Методы функционала плотности, полуэмпирические, неэмпирические методы решения электронного уравнения Шредингера для многоатомных молекул

Молекулы с замкнутыми электронными оболочками. Основные идеи метода молекулярных орбиталей МО ЛКАО. Гибридизация электронных орбиталей и геометрия молекул. Свойства многоэлектронной волновой функции. Детерминант Слэтера и уравнения Хартри-Фока. Методы решения электронного уравнения Шредингера: неэмпирические, полуэмпирические и методы теории функционала плотности. Равновесная геометрия молекулы.

Тема 8. Поверхность потенциальной энергии, её свойства и расчеты

Рентгеноструктурный анализ. Дефектоскопия. Рентгеновский спектральный анализ. Понятие о химической кинетике. Механизм химической реакции. Элементарная стадия химической реакции. Константа скорости химической реакции. Уравнение Аррениуса: эффективная энергия активации реакции и предэкспоненциальный множитель.

Тема 9. Химическая связь и теория Бейдера

Квантовые числа. Принцип Паули. Принцип минимальной энергии. Правило Гунда. Правило Клечковского. Главное квантовое число. Орбитальное квантовое число.

Квантово-химические методы трактовки ковалентной связи. Принцип локализованных пар и максимального перекрывания. Семиполярная связь и донорно-акцепторное взаимодействие.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);

- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
 - критерии оценивания для каждого оценочного средства;
 - содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.
- Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

морас - <http://openmoras.net>

Orbital Viewer - <http://www.orbitals.com/orb/ov.htm>

Научная электронная библиотека - eLibrary.ru <http://elibrary.ru/>

сайт Бесплатных полнотекстовых журналов по химии - <http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/a.html>

сайт Химического факультета МГУ - <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/kovba-pupyshev/welcome.html>

электронная библиотечная система Издательства - <http://e.lanbook.com/>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	В ходе лекционных занятий вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации, положительный опыт в ораторском искусстве. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций
лабораторные работы	Прежде чем приступить к изучению темы, необходимо прокомментировать основные вопросы плана семинара. Такой подход преподавателя помогает студентам быстро находить нужный материал к каждому из вопросов, не задерживаясь на второстепенном. Начиная подготовку к семинарскому занятию, необходимо, прежде всего, указать студентам страницы в конспекте лекций, разделы учебников и учебных пособий, чтобы они получили общее представление о месте и значении темы в изучаемом курсе. Затем следует рекомендовать им поработать с дополнительной литературой, сделать записи по рекомендованным источникам.

Вид работ	Методические рекомендации
самостоятельная работа	руководствоваться графиком самостоятельной работы, определенным РПД; выполнять все плановые задания, выдаваемые преподавателем для самостоятельного выполнения, и разбирать на семинарах и консультациях неясные вопросы; использовать при подготовке нормативные документы университета, а именно, положения о реферате, эссе, контрольной работе, домашнем творческом задании, расчетно-аналитической работе; при подготовке к экзамену параллельно прорабатывать соответствующие теоретические и практические разделы дисциплины, фиксируя неясные моменты для их обсуждения на плановой консультации.
зачет	подготовка к зачету включает в себя: <input type="checkbox"/> проработку основных вопросов курса; <input type="checkbox"/> чтение основной и дополнительной литературы по темам курса; <input type="checkbox"/> подбор примеров из практики, иллюстрирующих теоретический материал курса; <input type="checkbox"/> выполнение промежуточных и итоговых тестов по дисциплине; <input type="checkbox"/> систематизацию и конкретизацию основных понятий дисциплины; <input type="checkbox"/> составление примерного плана ответа на вопросы.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Специализированная лаборатория.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;

- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 44.03.01 "Педагогическое образование" и профилю подготовки "Химия".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.04.02 Общие основы квантовой химии

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 44.03.01 - Педагогическое образование

Профиль подготовки: Химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2019

Основная литература:

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. - 4-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - ISBN 978-5-00101-502-4. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/94104> (дата обращения: 04.03.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул : учебное пособие / И. Майер ; под редакцией А. Л. Чугреева ; перевод с английского М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 387 с. - ISBN 978-5-00101-501-7. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/94102> (дата обращения: 04.03.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература:

1. Грибов, Л. А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул: учебное пособие / Л.А. Грибов. - Долгопрудный: Интеллект, 2010. - 312 с. ISBN 978-5-91559-082-2. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/193501> (дата обращения: 04.03.2020). - Режим доступа: по подписке.
2. Боженко К.В., Основы квантовой химии : конспект лекций / К.В. Боженко. - Москва: Издательство РУДН, 2010. - 124 с. - ISBN 978-5-209-03510-7 - Текст : электронный // ЭБС 'Консультант студента' : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785209035107.html> (дата обращения: 04.03.2020). - Режим доступа : по подписке.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.04.02 Общие основы квантовой химии

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 44.03.01 - Педагогическое образование

Профиль подготовки: Химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2019

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.