

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Аксёнов Александр Викторович
Должность: Декан химического факультета
Дата подписания: 19.06.2026 12:58:36
Уникальный программный ключ:
073635787274402487435acab3ab854864d48641

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего
образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
д.х.н., проф. Аксенов А.В.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Квантовая химия

Направление подготовки
Направленность (профиль)
Год начала обучения
Форма обучения
Реализуется в семестре

04.03.01 Химия
Неорганическая и аналитическая химия
2026
очная
6

Разработано

доцент кафедры физической химии,
к.х.н., Тимченко В.П.

Ставрополь 2026 г.

1. Цель и задачи освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины «Квантовая химия» является формирование набора универсальных (УК-6) и общепрофессиональных (ОПК-1, ОПК-3) компетенций будущего бакалавра по направлению подготовки 04.03.01 Химия.

Задачи освоения дисциплины: кратко, но строго и систематизировано изучить наиболее значимые для квантовой химии теоретические понятия; овладеть навыками решения практических задач и исследовательской работы, а также закрепить в памяти студентов теоретические сведения о методах квантовой химии, убедиться в их действенности.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Квантовая химия» Б1.О.06.02 относится к обязательным дисциплинам учебного плана. Ее освоение проходит в 6 семестре.

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код, формулировка компетенции	Код, формулировка индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), характеризующие этапы формирования компетенций, индикаторов
УК -6 Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	ИД-1 УК-6 Устанавливает личные и профессиональные цели в соответствии с уровнем своих ресурсов и приоритетов действий, для успешного развития в избранной сфере профессиональной деятельности	Знает правовые, экономические и профессиональные нормы и обязанности Владеет навыками самоорганизации и саморазвития
	ИД-2 УК-6 Реализует и корректирует стратегию личностного и профессионального развития, с учетом условий, средств, личностных возможностей, этапов карьерного роста, временной перспективы развития деятельности и требований рынка труда	Умеет работать с источниками научно-технической информации, научной литературы, баз данных в области фундаментальной и прикладной химии, составлять готовый информационный продукт в области профессиональной деятельности Владеет методами оформления результатов деятельности в избранной предметной области
	ИД-3 УК-6 Критически оценивает эффективность	Умеет планировать научные исследования в профессиональной

	использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач в избранной сфере профессиональной деятельности	деятельности и обобщать полученные результаты
ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ИД-1 ОПК-1 Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	Знает концепции основных разделов современной химической науки Владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях
	ИД-2 ОПК-1 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	Знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии Владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовки научных текстов
	ИД-3 ОПК-1 Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	Знает технологические требования и нормативы Умеет пользоваться современными информационно-коммуникационными технологиями для поиска и обработки информации, работы с базами данных, презентации результатов в избранной предметной области
ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ИД-1 ОПК-3 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знает математические основы методов анализа экспериментальных данных Владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии
	ИД-2 ОПК-3 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Знает информационные основы методов анализа экспериментальных данных Владеет навыками решения химических задач

4. Объем учебной дисциплины (модуля) и формы контроля

Объем занятий: всего: <u>3</u> з.е. 108 ч.	ОФО, в часах
Контактная работа:	72
Лекции/из них практическая подготовка	36/0
Лабораторных работ/из них практическая подготовка	36/0
Практических занятий/из них практическая подготовка	-
Самостоятельная работа	36
Формы контроля	
Экзамен	-
Зачет	-
Зачет с оценкой	6
Курсовая работа	Нет

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием количества часов и видов занятий

№	Раздел (тема) дисциплины и краткое содержание	Формируемы е компетенции, индикаторы	Очная форма обучения				Формы теку щего контроля успе ваемости
			Контактная работа обучающихся с преподавателем /из них в форме практической подготовки, часов			Самостоятельная работа, часов	
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы		
1	Принцип суперпозиции состояний Принцип суперпозиции состояний. Принцип неопределенности. Линейные операторы. Собственные векторы и собственные значения эрмитова оператора. Существование волновой функции, измеряемые величины, средние значения физических величин. Уравнение Шредингера: временное и стационарное. Квантовые состояния гармонического осциллятора. Уровни энергии и собственные функции. Собственные функции и собственные значения оператора квадрата углового (орбитального) момента.	ИД-1 УК-6 ИД-2 УК-6 ИД-3 УК-6 ИД-1 ОПК-1 ИД-2 ОПК-1 ИД-3 ОПК-1 ИД-1 ОПК-3 ИД-2 ОПК-3	4/0	-	4/0	4	Контрольная работа

2	Квантово-механическое описание молекулы Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Решение задачи о состояниях одноэлектронного атома. Угловая и радиальная задачи: сферические и радиальные функции; орбитали s-, p-, d- типа; радиальные функции распределения электронной плотности. Приближение Борна-Оппенгеймера. Электронные и ядерные функции. Поверхность потенциальной энергии: устойчивые, неустойчивые и метастабильные конфигурации молекул. Построение приближенных решений электронного уравнения. Одноэлектронное приближение. Принцип тождественности частиц и принцип Паули. Определитель Слейтера. Электронная плотность молекулы.	ИД-1 УК-6 ИД-2 УК-6 ИД-3 УК-6 ИД-1 ОПК-1 ИД-2 ОПК-1 ИД-3 ОПК-1 ИД-1 ОПК-3 ИД-2 ОПК-3	4/0	-	4/0	4	Контрольная работа
3	Метод Хартри-Фока Фокиан, кулоновские и обменные операторы. Канонические уравнения Хартри-Фока и канонические орбитали. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока-Рутана. Представление о схеме ССП. Понятие базисного набора; орбитали Слейтеровского и Гауссового типа. Молекулярные интегралы.	ИД-1 УК-6 ИД-2 УК-6 ИД-3 УК-6 ИД-1 ОПК-1 ИД-2 ОПК-1 ИД-3 ОПК-1 ИД-1 ОПК-3 ИД-2 ОПК-3	4/0	-	4/0	4	Контрольная работа
4	Учет электронной корреляции Вариационный метод: метод конфигурационного взаимодействия (КВ). Вариационный метод: варианты КВ1, КВ1+2 и полное КВ. Учет электронной корреляции по теории возмущений Меллера-Плессе (МП); вариант МП2. Методы связанных кластеров	ИД-1 УК-6 ИД-2 УК-6 ИД-3 УК-6 ИД-1 ОПК-1 ИД-2 ОПК-1 ИД-3 ОПК-1 ИД-1 ОПК-3 ИД-2 ОПК-3	4/0	-	4/0	4	Коллоквиум
5	Основы метода функционала плотности Теорема Хоэнберга-Кона и функционал энергии. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционные функционалы.	ИД-1 УК-6 ИД-2 УК-6 ИД-3 УК-6 ИД-1 ОПК-1 ИД-2 ОПК-1 ИД-3 ОПК-1 ИД-1 ОПК-3 ИД-2 ОПК-3	4/0	-	4/0	4	Контрольная работа

6	Учет влияния среды Модель диэлектрического континуума. Реактивное поле Онзагера. Понятие виртуальной полости, окружающей молекулу в среде. Поле в полости. Метод самосогласованного реактивного поля (SCRF). Метод поляризуемого континуума (PCM).	ИД-1 УК-6 ИД-2 УК-6 ИД-3 УК-6 ИД-1 ОПК-1 ИД-2 ОПК-1 ИД-3 ОПК-1 ИД-1 ОПК-3 ИД-2 ОПК-3	4/0	-	4/0	4	Контрольная работа
7	Полуэмпирические методы квантовой химии Приближение нулевого дифференциального перекрывания. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (CNDO). Частичное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (INDO). Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием: методы MNDO, AM1, PM3.	ИД-1 УК-6 ИД-2 УК-6 ИД-3 УК-6 ИД-1 ОПК-1 ИД-2 ОПК-1 ИД-3 ОПК-1 ИД-1 ОПК-3 ИД-2 ОПК-3	4/0	-	4/0	4	Контрольная работа
8	Квантово-химические расчеты физических характеристик Расчеты электрических характеристик, дипольных моментов и молекулярных поляризуемостей разных порядков.	ИД-1 УК-6 ИД-2 УК-6 ИД-3 УК-6 ИД-1 ОПК-1 ИД-2 ОПК-1 ИД-3 ОПК-1 ИД-1 ОПК-3 ИД-2 ОПК-3	4/0	-	4/0	4	Коллоквиум
9	Применение методов квантовой химии для моделирования химической реакции Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции. Изучение механизмов химических реакций.	ИД-1 УК-6 ИД-2 УК-6 ИД-3 УК-6 ИД-1 ОПК-1 ИД-2 ОПК-1 ИД-3 ОПК-1 ИД-1 ОПК-3 ИД-2 ОПК-3	4/0	-	4/0	4	Контрольная работа
ИТОГО			36/0		36/0	36	

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю) Квантовая химия базируется на перечне осваиваемых компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения дисциплины (модуля). ФОС обеспечивает объективный контроль достижения запланированных результатов обучения. ФОС включает в себя:

- описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания;
- методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций (включаются в методические указания/рекомендации по тем видам работ, которые предусмотрены учебным планом и предусматривают оценку сформированности компетенций);
- типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений и уровня овладения формируемыми компетенциями в процессе освоения дисциплины (модуля).

ФОС является приложением к данной программе дисциплины (модуля).

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Приступая к работе, каждый студент должен принимать во внимание следующие положения.

Дисциплина (модуль) построена по тематическому принципу, каждая тема представляет собой логически завершённый раздел.

Лекционный материал посвящён рассмотрению ключевых, базовых положений курсов и разъяснению учебных заданий, выносимых на самостоятельную работу студентов.

Практические занятия проводятся с целью закрепления усвоенной информации, приобретения навыков ее применения при решении практических задач в соответствующей предметной области.

Самостоятельная работа студентов направлена на самостоятельное изучение дополнительного материала, подготовку к практическим и лабораторным занятиям, а также выполнения всех видов самостоятельной работы.

Для успешного освоения дисциплины, необходимо выполнить все виды самостоятельной работы, используя рекомендуемые источники информации.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

8.1. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

8.1.1. Перечень основной литературы:

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. — Москва: Лаборатория знаний, 2021. — 520 с. — ISBN 978-5-93208-518-9. — Текст: электронный // IPR SMART: [сайт]. — URL: <https://www.iprbookshop.ru/105769.html>.
2. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 1. Квантовая механика: учебник и практикум для вузов/ А.И. Ермаков. — Москва: Издательство Юрайт, 2023. — 183 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00127-3. — Текст: электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/513797>
3. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2. Квантовая химия: учебник и практикум для вузов/ А.И. Ермаков. — Москва: Издательство Юрайт, 2023. — 402 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00128-0. — Текст: электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/513798>

8.1.2. Перечень дополнительной литературы:

1. Майер И. (Иштван). Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул. Москва БИНОМ. Лаб. знаний, 2006. - 384 с.
2. Грибов Л. А., Баранов В. И. Теория и методы расчета молекулярных процессов: спектры, химические превращения и молекулярная логика. Москва [КомКнига], 2006. 476 с.
3. Хёльте, Х.-Д. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х.-Д. Хёльте, В. Зиппель, Д. Роньян, Г. Фолькерс. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. — 318 стр.

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

8.3. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. Электронно-библиотечная система IPRbooks. Договор № 2039/16 от 27.04.2016 (базовая коллекция). Организация: ООО «Ай Пи Эр Медиа». Срок действия договора: 06.06.2016г. – 06.06.2019 г. Обновлено 13.05.2019. URL: <http://www.iprbookshop.ru>
2. Образовательная платформа для университетов и колледжей Юрайт. Регистрационный номер и дата принятия решения о регистрации: серия Эл № ФС77-78116 от 13 марта 2020 г. URL: <http://www.urait.ru>

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

При чтении лекций используется компьютерная техника, демонстрации презентационных мультимедийных материалов. На семинарских и практических занятиях студенты представляют презентации, подготовленные ими в часы самостоятельной работы.

Информационные справочные системы:

Информационно-справочные и информационно-правовые системы, используемые при изучении дисциплины:

1	База данных Spectral Database for Organic Compounds (SDBS) http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs
2	База данных Chemeo - http://chemeo.com
3	База данных NIST Chemistry WebBook - http://webbook.nist.gov/chemistry
4	База данных результатов квантовхимических расчетов Computed Property Data Base for Molecules (CPDB) - http://riodb.ibase.aist.go.jp/cpdb/index_e.html
5	База данных химических сдвигов NmrShiftDB2 - http://nmrshiftdb.nmr.uni-koeln.de

Программное обеспечение:

1	Операционная система: Microsoft Windows 8: Бессрочная лицензия. Договор № 01-эа/13 от 25.02.2013.
2	Операционная система: Microsoft Windows 10: Бессрочная лицензия. Договор № 544-21 от 08.06.2021.
3	Базовый пакет программ Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint). Microsoft Office Standard 2013: договор № 01-эа/13 от 25.02.2013г., Лицензия Microsoft Office https://support.microsoft.com/ru-ru/lifecycle/search/16674
4	Программа Firefly - http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5	Hyperchem 8 Комплексный программный продукт, предназначенный для задач квантово-механического моделирования атомных и молекулярных структур. Включает в себя программы, реализующие методы молекулярной механики, квантовой химии и молекулярной динамики. http://www.hyper.com/
6	Q-Chem Комплекс инструментов неэмпирической химии для точного прогнозирования молекулярных структур, реактивности, колебательного, электронного спектра и спектра ядерного магнитного резонанса. Предлагает передовую методологию, начиная с высокопроизводительных вычислений теории функционала плотности/метода Хартри-Фока и заканчивая высокоуровневыми пост-методами Хартри-Фока для учета электронной корреляции. Включает в себя интегрированный графический интерфейс и генератор ввода, обширный набор функций и методов корреляции, включая методы для электронно-возбужденных состояний и систем с открытой оболочкой. http://www.q-chem.com/

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

Лекционные занятия	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, укомплектованная специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации: компьютер (переносной ноутбук), проектор (переносной проектор), доска магнитно-маркерная. Учебно-наглядные пособия в виде тематических презентаций, соответствующих рабочим программам дисциплин.
	Фонды и ресурсы Научной библиотеки СКФУ
Практические занятия	Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа, укомплектованная специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации: компьютер (переносной ноутбук), проектор (переносной проектор), доска магнитно-маркерная.
	Фонды и ресурсы Научной библиотеки СКФУ
Самостоятельная работа	Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.
	Фонды и ресурсы Научной библиотеки СКФУ

11. Особенности освоения дисциплины (модуля) лицами с ограниченными возможностями здоровья

Обучающимся с ограниченными возможностями здоровья предоставляются специальные учебники, учебные пособия и дидактические материалы, специальные технические средства обучения коллективного и индивидуального пользования, услуги ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь, а также услуги сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков.

Освоение дисциплины (модуля) обучающимися с ограниченными возможностями здоровья может быть организовано совместно с другими обучающимися, а также в отдельных группах.

Освоение дисциплины (модуля) обучающимися с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья.

В целях доступности получения высшего образования по образовательной программе лицами с ограниченными возможностями здоровья при освоении дисциплины (модуля) обеспечивается:

1) для лиц с ограниченными возможностями здоровья по зрению:

- присутствие ассистента, оказывающий студенту необходимую техническую помощь с учетом индивидуальных особенностей (помогает занять рабочее место, передвигаться, прочитать и оформить задание, в том числе, записывая под диктовку),
- письменные задания, а также инструкции о порядке их выполнения оформляются увеличенным шрифтом,
- специальные учебники, учебные пособия и дидактические материалы (имеющие крупный шрифт или аудиофайлы),
- индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс,
- при необходимости студенту для выполнения задания предоставляется увеличивающее устройство;

2) для лиц с ограниченными возможностями здоровья по слуху:

- присутствие ассистента, оказывающий студенту необходимую техническую помощь с учетом индивидуальных особенностей (помогает занять рабочее место, передвигаться, прочитать и оформить задание, в том числе, записывая под диктовку),

- обеспечивается наличие звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования, при необходимости обучающемуся предоставляется звукоусиливающая аппаратура индивидуального пользования;

- обеспечивается надлежащими звуковыми средствами воспроизведения информации;

3) для лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата (в том числе с тяжелыми нарушениями двигательных функций верхних конечностей или отсутствием верхних конечностей):

- письменные задания выполняются на компьютере со специализированным программным обеспечением или надиктовываются ассистенту;

- по желанию студента задания могут выполняться в устной форме.

12. Особенности реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения

Согласно части 1 статьи 16 Федерального закона от 29 декабря 2012 г. № 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации» под *электронным обучением* понимается организация образовательной деятельности с применением содержащейся в базах данных и используемой при реализации образовательных программ информации и обеспечивающих ее обработку информационных технологий, технических средств, а также информационно-телекоммуникационных сетей, обеспечивающих передачу по линиям связи указанной информации, взаимодействие обучающихся и педагогических работников. Под *дистанционными образовательными технологиями* понимаются образовательные технологии, реализуемые в основном с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) взаимодействии обучающихся и педагогических работников.

Реализация дисциплины может быть осуществлена с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично. Компоненты УМК дисциплины (рабочая программа дисциплины, оценочные и методические материалы, формы аттестации), реализуемой с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения, содержат указание на их использование.

При организации образовательной деятельности с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения могут предусматриваться асинхронный и синхронный способы осуществления взаимодействия участников образовательных отношений посредством информационно-телекоммуникационной сети «Интернет».

При применении дистанционных образовательных технологий и электронного обучения в расписании по дисциплине указываются: способы осуществления взаимодействия участников образовательных отношений посредством информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (ВКС-видеоконференцсвязь, ЭТ – электронное тестирование); ссылки на электронную информационно-образовательную среду СКФУ, на образовательные платформы и ресурсы иных организаций, к которым предоставляется открытый доступ через информационно-телекоммуникационную сеть «Интернет»; для синхронного обучения - время проведения онлайн-занятий и преподаватели; для асинхронного обучения - авторы онлайн-курсов.

При организации промежуточной аттестации с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения используются Методические рекомендации по применению технических средств, обеспечивающих объективность

результатов при проведении промежуточной и государственной итоговой аттестации по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета и программам магистратуры с применением дистанционных образовательных технологий (Письмо Минобрнауки России от 07.12.2020 г. № МН-19/1573-АН "О направлении методических рекомендаций").

Реализация дисциплины с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий осуществляется с использованием электронной информационно-образовательной среды СКФУ, к которой обеспечен доступ обучающихся через информационно-телекоммуникационную сеть «Интернет», или с использованием ресурсов иных организаций, в том числе платформ, предоставляющих сервисы для проведения видеоконференций, онлайн-встреч и дистанционного обучения (МТС-Линк), а также с использованием возможностей социальных сетей для осуществления коммуникации обучающихся и преподавателей.

Учебно-методическое обеспечение дисциплины, реализуемой с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий, включает представленные в электронном виде рабочую программу, учебно-методические пособия или курс лекций, методические указания к выполнению различных видов учебной деятельности обучающихся, предусмотренных дисциплиной, и прочие учебно-методические материалы, размещенные в информационно-образовательной среде СКФУ.