

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Аксёнов Александр Викторович
Должность: Декан химического факультета
Дата подписания: 17.06.2026 17:41:09
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
Аксёнов А.В.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Квантовая химия
модуль Дисциплины специальности химия

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

04.03.01 Химия
Органическая и медицинская химия
2026
очная

Разработано
доцент кафедры физической химии
Тимченко В.П.

Ставрополь 2026 г.

1. Цель и задачи освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины «Квантовая химия» является формирование набора универсальных 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

«Квантовая химия» относится к дисциплинам обязательной части. 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, как установить личные и профессиональные цели в соответствии с уровнем своих ресурсов и приоритетов действий, для успешного развития в избранной сфере профессиональной деятельности Умеет устанавливать личные и профессиональные цели в соответствии с уровнем своих ресурсов и приоритетов действий, для успешного развития в избранной сфере профессиональной деятельности Владеет навыком установки личных и профессиональных целей в соответствии с уровнем своих ресурсов и

		приоритетов действий, для успешного развития в избранной сфере профессиональной деятельности
	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	Знает, как реализовать и корректировать стратегию личностного и профессионального развития, с учетом условий, средств, личностных возможностей, этапов карьерного роста, временной перспективы развития деятельности и требований рынка труда Умеет реализовать и корректировать стратегию личностного и профессионального развития, с учетом условий, средств, личностных возможностей, этапов карьерного роста, временной перспективы развития деятельности и требований рынка труда Владеет навыком реализации и корректировки стратегии личностного и профессионального развития, с учетом условий, средств, личностных возможностей, этапов карьерного роста, временной перспективы развития деятельности и требований рынка труда
	ИД-3 УК-6 Критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач в избранной сфере профессиональной	Знает, как критически оценить эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач в избранной сфере профессиональной

	деятельности	деятельности Умеет критически оценить эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач в избранной сфере профессиональной деятельности Владеет навыком критической оценки эффективности использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач в избранной сфере профессиональной деятельности
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, как систематизировать и анализировать результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов Умеет систематизировать и анализировать результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов Владеет навыком систематизировать и анализировать результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов
	ИД-2 ОПК-1 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием	Знает, как интерпретировать результаты собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием

	теоретических основ традиционных и новых разделов химии	теоретических основ традиционных и новых разделов химии Умеет интерпретировать результаты собственных экспериментов и расчетно- теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии Владеет интерпретацией результатов собственных экспериментов и расчетно- теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии
	ИД-3 ОПК-1 Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	Знает, как формулировать заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно- теоретических работ химической направленности Умеет формулировать заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно- теоретических работ химической направленности Владеет навыком формулировать заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно- теоретических работ химической направленности

		работ химической направленности
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, как применить теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности Умеет применять теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности Владеет навыками применения теоретических и полуэмпирических моделей при решении задач химической направленности
	ИД-2 ОПК-3 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Знает, как использовать стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности Умеет использовать стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности Владеет навыком использования программного обеспечения при решении задач химической направленности

4. Объем учебной дисциплины (модуля) и формы контроля

Объем занятий: всего: 3 з.е. 108 акад.ч.	ОФО, в акад. часах
Контактная работа:	72
Лекции/из них практическая подготовка	36
Лабораторных работ/из них практическая подготовка	36
Практических занятий/из них практическая подготовка	-
Самостоятельная работа	36
Формы контроля	

Экзамен	-
Зачет	-
Зачет с оценкой	6 семестр
Курсовая работа	нет

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

№	Раздел (тема) дисциплины и краткое содержание	Формируемые компетенции, индикаторы	Очная форма обучения				Формы текущего контроля успеваемости
			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. Тематика практических занятий представлена в методических указаниях	УК-6 ОПК-1 ОПК-3	4	-	4	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. Тематика практических занятий представлена в методических указаниях	УК-6 ОПК-1 ОПК-3	4	-	4	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. Тематика практических занятий представлена в методических указаниях	УК-6 ОПК-1 ОПК-3	4	-	4	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. Тематика практических занятий представлена в методических указаниях	УК-6 ОПК-1 ОПК-3	4	-	4	4	Коллоквиум

5	Основы метода функционала плотности Теорема Хоэнберга-Кона и функционал энергии. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционные функционалы. Тематика практических занятий представлена в методических указаниях	УК-6 ОПК-1 ОПК-3	4	-	4	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). Тематика практических занятий представлена в методических указаниях	УК-6 ОПК-1 ОПК-3	4	-	4	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. Тематика практических занятий представлена в методических указаниях	УК-6 ОПК-1 ОПК-3	4	-	4	4	Контрольная работа
8	Квантово-химические расчеты физических характеристик Расчеты электрических характеристик, дипольных моментов и молекулярных поляризуемостей разных порядков. Тематика практических занятий представлена в методических указаниях	УК-6 ОПК-1 ОПК-3	4	-	4	4	Коллоквиум
9	Применение методов квантовой химии для моделирования химической реакции Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции. Изучение механизмов химических реакций. Тематика практических занятий представлена в методических указаниях	УК-6 ОПК-1 ОПК-3	4	-	4	4	Контрольная работа

	ИТОГО		36	-	36	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 посвящен рассмотрению ключевых, базовых положений курсов и разъяснению учебных заданий, выносимых на самостоятельную работу студентов.

Лабораторные занятия направлены на приобретение опыта практической работы 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	Альт Рабочая станция 10
2	Альт Рабочая станция К
3	АЛЬТ «Сервер»
4	Пакет офисных программ - Р7-Офис

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

Лекционные занятия	Учебная аудитория для проведения учебных занятий, оснащенная мультимедийным оборудованием и техническими средствами обучения.
Лабораторные занятия	Специализированная лаборатория
Самостоятельная работа	Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащенное компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и возможностью доступа к электронной информационно-образовательной среде университета

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.