

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Ястребов Олег Александрович  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 14.06.2022 15:24:42  
Уникальный программный ключ:  
ca953a0120d891083f9396730c4519891c7187

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Российский университет дружбы народов»**

**Факультет физико-математических и естественных наук**  
(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

Избранные главы квантовой химии

(наименование дисциплины/модуля)

**Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:**

04.04.01 «Химия»

(код и наименование направления подготовки/специальности)

**Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):**

«Фундаментальная и прикладная химия»

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2022 г.

## 1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Основной целью освоения дисциплины «Избранные главы квантовой химии» является ознакомление студентов с популярными расчетными методами современной квантовой химии, включающими наиболее точные методы расчета электронной и геометрической структуры молекул, которые используются для получения важной и труднодоступной для эксперимента информации.

## 2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Избранные главы квантовой химии» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

*Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)*

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
УК-6	Способность определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания.
		УК-6.2. Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям.
		УК-6.3. Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда.
УК-7	Способность: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку	УК-7.1. Использует цифровые технологии и методы поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии.
		УК-7.2. Разрабатывает концепцию цифровых технологий и методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в рамках обозначенной проблемы: формулирует цель, задачи, обосновывает актуальность, значимость, ожидаемые результаты и возможные сферы их применения в условиях цифровой экономики и современной корпоративной информационной культуры.
		УК-7.3. Осуществляет мониторинг использования цифровых технологий и методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии, корректирует отклонения, вносит дополнительные изменения в план использования цифровых технологий.

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
	информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	
М-ПК-1-н	Способность планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий.
		М-ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.
М-ПК-2-н	Способность проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных.
		М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии).

### 3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Избранные главы квантовой химии» относится к элективной компоненте блока Б1 ОП ВО.

В рамках ОП ВО обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Избранные главы квантовой химии».

*Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины*

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
УК-6	Способность определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	Актуальные задачи современной химии Кинетика элементарных реакций Статистическая термодинамика Катализ Термодинамика неравновесных процессов Нанохимия Адсорбция	Преддипломная практика

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
		Физико-химия поверхности и хемосорбция Экспериментальные методы исследования в химии Научно-исследовательская работа	
УК-7	Способность: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	Актуальные задачи современной химии Научно-исследовательская работа	Преддипломная практика
М-ПК-1-н	Способность планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских	Кинетика элементарных реакций Статистическая термодинамика Катализ	Преддипломная практика

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
	задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	Термодинамика неравновесных процессов Нанохимия Адсорбция Физико-химия поверхности и хемосорбция Экспериментальные методы исследования в химии Научно-исследовательская работа	
М-ПК-2-н	Способность проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Кинетика элементарных реакций Статистическая термодинамика Катализ Термодинамика неравновесных процессов Нанохимия Адсорбция Физико-химия поверхности и хемосорбция Экспериментальные методы исследования в химии Научно-исследовательская работа	Преддипломная практика

\* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

#### 4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Избранные главы квантовой химии» составляет 3 зачетные единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения ОП ВО для **ОЧНОЙ** формы обучения

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)			
		1	2	3	4
Контактная работа, ак.ч.	36			36	
в том числе:					
Лекции (ЛК)	36			36	
Лабораторные работы (ЛР)					

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)			
		1	2	3	4
Практические/семинарские занятия (СЗ)					
Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.	54			54	
Контроль (зачет с оценкой), ак.ч.	18			18	
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	108		108	
	зач.ед.	3		3	

## 5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
Раздел 1. Особенности различных подходов в методе Хартри-Фока	Тема 1.1. Неограниченный и ограниченный методы Хартри-Фока. Ограниченный метод Хартри – Фока для замкнутых оболочек.	ЛК
	Тема 1.2. Неограниченный метод Хартри – Фока. Ограниченный метод Хартри – Фока для открытых оболочек. Операторы проектирования. Теорема Бриллюэна.	ЛК
Раздел 2. Базисные функции, используемые в современных квантово – химических программах	Тема 2.1. Слэтеровские базисы. Гауссовские базисы. Минимальные базисы. Расширенные базисы. Валентно-расщепленные базисы. Базисы, содержащие поляризационные функции. Базисы, содержащие диффузные функции.	ЛК
Раздел 3. Пост Хартри - Фоковские методы неэмпирической квантовой химии	Тема 3.1. Учет энергии электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия. Ограничение кратности возбуждений. Ограничение размеров активного пространства.	ЛК
	Тема 3.2. Метод CASSCF. Метод связанных кластеров. Метод многочастичной теории возмущений.	ЛК
	Тема 3.3. Теория возмущений Рэлея – Шредингера. Теория возмущений Меллера – Плессета. Метод функционала плотности.	ЛК
Раздел 4. Полуэмпирические методы квантовой химии	Тема 4.1. Приближение нулевого дифференциального перекрытия – НДП. Полное пренебрежение двухцентровым дифференциальным перекрытием - ПДДП. Частичное пренебрежение дифференциальным перекрытием – ЧПДП.	ЛК
	Тема 4.2. Модифицированное частичное пренебрежение дифференциальным перекрытием – МЧПДП. Модифицированное пренебрежение двухатомным перекрытием – МПДП. Методы AM1 и PM3.	ЛК

\* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – семинарские занятия.

## 6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	
Для самостоятельной работы обучающихся	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС. Ауд 708.	

## 7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Основная литература:

1. Боженко Константин Викторович. Основы квантовой химии. Конспект лекций / К.В. Боженко. М.: Изд-во РУДН, 2010. - 124 с.: ил.
2. Боженко Константин Викторович. Основы квантовой химии. Конспект лекций: Учебное пособие. Ч. 2 / К.В. Боженко. - Электронные текстовые данные. М.: Изд-во РУДН, 2012. - 67 с.

### Дополнительная литература:

1. Боженко Константин Викторович. Методические указания по изучению курса "Основы квантовой химии": Учебное пособие. Раздел 1: Классическая механика / К.В. Боженко. М.: Изд-во РУДН, 2005. - 22 с.: ил.
2. Боженко Константин Викторович. Методические указания по изучению курса "Основы квантовой химии": Учебное пособие. Раздел 2: Квантовая механика / К.В. Боженко. М.: Изд-во РУДН, 2005. - 22 с.: ил.

### Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров:
  - Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН <http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>
  - ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>
  - ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>
  - ЭБС «Консультант студента» [www.studentlibrary.ru](http://www.studentlibrary.ru)
  - ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com/>
  - ЭБС «Троицкий мост»

2. Базы данных и поисковые системы:

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации  
<http://docs.cntd.ru/>

- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>

- поисковая система Google <https://www.google.ru/>

- реферативная база данных SCOPUS  
<http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

*Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля\*:*

1. Курс лекций по дисциплине «Избранные главы квантовой химии».

\* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

## **8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система\* оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Избранные главы квантовой химии» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе дисциплины.

\* - ОМ и БРС формируются на основании требований соответствующего локального нормативного акта РУДН (положения/порядка).

### **РАЗРАБОТЧИКИ:**

**Профессор кафедры  
физической и  
коллоидной химии**



**Боженко К.В.**

Должность, БУП

Подпись

Фамилия И.О.

### **РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:**

**Кафедра физической и  
коллоидной химии**



**Чередниченко А.Г.**

Наименование БУП

Подпись

Фамилия И.О.

### **РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:**

**Декан ФФМиЕН,  
заведующий кафедрой  
органической химии**



**Воскресенский Л.Г.**

Должность, БУП

Подпись

Фамилия И.О.