Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 15.05.2026 12:05:31
Уникальный программный ключ:
ca953a0120d891083f939673078ef1a989dae18a

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»

Факультет физико-математических и естественных наук

(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

04.03.01 ХИМИЯ

(код и наименование направления подготовки/специальности)

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

ХИМИЯ

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2026 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Основы квантовой химии» входит в программу бакалавриата «Химия» по направлению 04.03.01 «Химия» и изучается в 5 семестре 3 курса. Дисциплину реализует Кафедра физической и коллоидной химии. Дисциплина состоит из 4 разделов и 9 тем и направлена на изучение квантово-механических и квантово-химических методов описания химических систем.

Целью освоения дисциплины является овладение студентами основами современной теоретической химии, ознакомление с квантово-механическими методами описания химических систем (атомов, молекул в газовой и жидкой фазе, кристаллов) и реакций; ознакомление студентов с основами квантовой химии, включающими ее базовый метод – метод молекулярных орбиталей (все самые точные методы расчета электронной и геометрической структуры молекул сегодня базируются именно на этом методе, так или иначе учитывая электронную корреляцию); изучение студентами основ квантовой механики в приложении к решению химических задач, а также теоретических и расчетных методов квантовой химии. Основное внимание уделяется не математическому аппарату, а расшифровке физического смысла понятий квантовой механики и квантовой химии, практическому овладению расчетными методами квантовой химии и анализу результатов квантово-химических расчётов.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Основы 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-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие;; УК-1.2 Определяет и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи;;
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1 Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов, свойств веществ и материалов;; ОПК-1.2 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии;;
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности;; ОПК-3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.;
ОПК-4	Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	ОПК-4.1 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности;; ОПК-4.2 Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик;; ОПК-4.3 Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.;

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	ПК-1.1 Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования; ПК-1.2 Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности; ПК-1.3 Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин;

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Основы квантовой химии» относится к обязательной части блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Основы 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-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	Математика; Физика; Цифровая грамотность; Неорганическая химия; Аналитическая химия; Органическая химия; Введение в специальность; *Продвинутый Excel***; *Основы программирования на Python***; *Инфографика и технология презентаций***; *SQL. Начальный курс***; *Python для анализа данных***; *Цифровые деловые коммуникации***; Дополнительные разделы высшей математики;	Учебная практика; Преддипломная практика; Физическая химия; Строение вещества; Коллоидная химия; Химические основы биологических процессов и экологии; Избранные главы химии; Экспериментальные методы исследования в химии; *Введение в химию координационных соединений***; *Основы нанохимии***; *Химия лекарственных веществ***; *Физико-химические методы исследования неорганических веществ***; *Стратегия органического синтеза***; *Основы нефтехимии***; *Fundamentals of Contemporary Mass Spectrometry***;
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	Неорганическая химия; Аналитическая химия; Органическая химия;	Учебная практика; Научно -исследовательская работа; Физическая химия; Химическая технология; Строение вещества; Коллоидная химия; Высокомолекулярные

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
			соединения; Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа; Хроматография; Основы электронной и колебательной спектроскопии; Основы ЯМР; Основы масс-спектрометрии; Химические основы биологических процессов и экологии; Избранные главы химии; Экспериментальные методы исследования в химии;
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Цифровая грамотность;	Научно -исследовательская работа; Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа; Хроматография; Основы электронной и колебательной спектроскопии; Основы ЯМР; Основы масс-спектрометрии;
ОПК-4	Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	Математика; Физика; Дополнительные разделы высшей математики;	Строение вещества;
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	Неорганическая химия; Аналитическая химия; Органическая химия; Введение в специальность;	Учебная практика; Научно -исследовательская работа; Преддипломная практика; Физическая химия; Химическая технология; Строение вещества; Коллоидная химия; Высокомолекулярные соединения; Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа; Хроматография; Основы электронной и колебательной спектроскопии; Основы ЯМР;

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
			Основы масс-спектрометрии; Химические основы биологических процессов и экологии; Избранные главы химии; Экспериментальные методы исследования в химии; *Физико-химические методы исследования неорганических веществ***; *Стратегия органического синтеза***; *Основы нефтехимии***; *Введение в химию координационных соединений***; *Основы нанохимии***; *Химия лекарственных веществ***; *Fundamentals of Contemporary Mass Spectrometry***;

* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО
** - элективные дисциплины /практики

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

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

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	**ВСЕГО,** ак.ч.		**Семестр(-ы)**
			5
Контактная работа, ак.ч.	*72*		*72*
Лекции (**ЛК**)	36		36
Лабораторные работы (**ЛР**)	36		36
Практические/семинарские занятия (**СЗ**)	0		0
Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.	*18*		*18*
Контроль (экзамен/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

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
Раздел 1	Введение	1.1	Предмет и история квантовой химии	Предмет квантовой химии. Задачи, решаемые квантовой химией. Связь квантовой химии с другими разделами химии. История квантовой механики и квантовой химии.	ЛК
Раздел 2	Классическая механика, как основа для изучения квантовой механики	2.1	Классическая механика, ее основные понятия. Законы Ньютона. Принцип относительности Галилея, системы координат, задача о кинетической энергии двух масс. Вращение твердого тела. Центр инерции механической системы. Жесткий ротатор, моменты инерции, элементы теории групп.	Классическая механика в форме уравнений Ньютона. Аналитическая механика. Преобразования координат и времени по принципу относительности Галилея. Обобщённые координаты. Задача двух тел в классической механике. Центр инерции. Вращательное движение. Моменты инерции. Классификация молекул по типу волчков. Элементы теории групп. Группы симметрии молекул.	ЛК
		2.2	Принцип наименьшего действия. Функция Лагранжа. Уравнения Лагранжа. Канонические уравнения Гамильтона. Законы сохранения, интегралы движения. Законы сохранения энергии, импульса и момента импульса. Гармонический осциллятор (классическое решение).	Принцип наименьшего действия и его роль в аналитической механике. Формализм Лагранжа и Гамильтона. Интегралы движения: энергия, импульс, момент импульса. Гармонический осциллятор. Типы молекулярных колебаний.	ЛК, ЛР
Раздел 3	Квантовая механика	3.1	Понятие о корпускулярно-волновом дуализме, гипотеза Луи де Бройля, опыты Дэвиссона и Джермера. Статистическое толкование волн де Бройля. Понятие измерения по Н. Бору и роль прибора в квантовой механике. Принцип неопределенности В. Гейзенберга, его физический смысл. Принцип дополнительности Н. Бора.	История развития квантовой механики. Понятие кванта. Корпускулярно-волновой дуализм. Волны де Бройля, их значение. Формулировки принципа неопределённости. Принцип дополнительности.	ЛК, ЛР
		3.2	Волновая функция системы, ее физический смысл. Принцип суперпозиции. Операторы квантовой механики и их основные свойства. Сложение и умножение операторов. Понятие о коммутаторах. Уравнение Шредингера, зависящее от	Методы описания состояния систем в квантовой механике: с помощью матриц и через задание волновой функции. Определение волновой функции и её свойства. Квантово-механические операторы, их свойства. Действия с операторами. Коммутатор и его значение в квантовой механике. Временное и стационарное уравнения Шрёдингера.	ЛК, ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
			времени. Стационарные состояния и стационарное уравнение Шредингера.		
		3.3	Момент импульса микрочастицы, коммутационные соотношения для его компонент и квадрата момента импульса. Спин электрона. Собственные значения квадрата оператора спина и их роль в определении качества волновых функций. Схемы сложения моментов Рассел – Саундерса и j-j связи.	Операторы момента импульса, спина, квадрата момента импульса, квадрата спина. Коммутационые соотношения. Полный момент системы. Расчёт полного момента методом Рассел-Саундерса и j-j связи.	ЛК, ЛР
		3.4	Квантовый осциллятор. Принципиальное отличие от классического гармонического осциллятора, энергия нулевых колебаний. Туннельный эффект, его парадоксальность. Частица в одномерном потенциальном ящике. Движение свободной частицы. Жесткий ротатор. Уравнение Шредингера для атома водорода. Теория возмущений Рэлея – Шредингера.	Решение стационарного уравнения Шредингера для свободной частицы; частицы в потенциальном ящике; частицы, проходящей через потенциальный барьер; гармонического осциллятора; жёсткого ротатора; водородоподобного атома. Атомные орбитали. Вычисление средних значений величин для водороподобных атомов. Принцип Паули. Теория возмущений в квантовой механике.	ЛК, ЛР
Раздел 4	Квантовая химия	4.1	Приближение Борна-Оппенгеймера. Вариационный метод и вариационный принцип. Одноэлектронное приближение. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении.	Невозможность точного решения уравнения Шредингера для многоэлектронных систем. Приближение Борна-Оппенгеймера. Адиабатическое приближение. Вариационный прицип и вариационный метод в квантовой химии. Одноэлектронное приближение. Полная энергия системы как совокупности ядер и электронов.	ЛК, ЛР
		4.2	Средняя энергия в одноэлектронном приближении. Уравнения Хартри и Хартри-Фока. Уравнения Хартри-Фока для замкнутых оболочек. Линейный вариационный метод. Уравнения Хартри-Фока-Рутаана.	Атомная система единиц. Детерминант Слэтера. Уравнения Хартри-Фока. Уравнения Хартри-Фока-Рутана. Электронная корреляция и методы её учёта: конфигурационное взаимодействие, метод связанных кластеров, теория возмущений, теория функционала электронной плотности.	ЛК, ЛР

* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: *ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – практические/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.	Microsoft Win 10 Домашняя для одного языка, Код продукта № 00327-60000-00000-AA717. Microsoft Office 365 ProPlus Код продукта 00202-50232-17683-AA087
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	Microsoft Win 10 Домашняя для одного языка, Код продукта № 00327-60000-00000-AA717. Microsoft Office 365 ProPlus Код продукта 00202-50232-17683-AA087
Для самостоятельной работы	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	Microsoft Win 10 Домашняя для одного языка, Код продукта № 00327-60000-00000-AA717. Microsoft Office 365 ProPlus Код продукта 00202-50232-17683-AA087

* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО**!

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия./ Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 441 с. https://urait.ru/book/kvantovaya-mehanika-i-kvantovaya-himiya-444811

2. Боженко К.В. Основы квантовой химии : конспект лекций : учебное пособие / Москва : РУДН, 2022. - 113 с.

3. Гельман Г. Квантовая химия / М.: Бином. Лаборатория знаний, 2011. - 533 с.

Дополнительная литература:

1. Майер И. Избранные главы квантовой химии: Доказательства теорем и выводы формул Пер. с англ. М.Б. Драховского, А.М. Токмачева; под ред. А.Л. Чугреева /М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. - 384 с.

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

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

4. Кукушкин А.К. Задачи по квантовой химии и строению молекул /М.: Изд-во МГУ, 1987. - 154 с.

5. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела /М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с.

6. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия /СПб.: Изд-во "Лань", 2017. - 428 с.

7. Костюков В.В. Теория квантовой химии /М.: ИНФРА-М, 2022. - 236 с.

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 https://mega.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
- ЭБС «Знаниум» https://znanium.ru/

2. Базы данных и поисковые системы

- Sage https://journals.sagepub.com/
- Springer Nature Link https://link.springer.com/
- Wiley Journal Database https://onlinelibrary.wiley.com/
- Наукометрическая база данных Lens.org https://www.lens.org

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

1. Курс лекций по дисциплине «Основы квантовой химии».
2. Практические задания по дисциплине «Основы квантовой химии»

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

РАЗРАБОТЧИК:

		Баранов Николай Игоревич
Должность, БУП	*Подпись*	*Фамилия И.О.*

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Заведующий кафедрой физической и коллоидной химии		Чередниченко Александр Генрихович
Должность БУП	*Подпись*	*Фамилия И.О.*

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Заведующий кафедрой общей и неорганической химии		Хрусталев Виктор Николаевич
Должность, БУП	*Подпись*	*Фамилия И.О.*