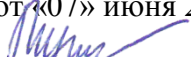



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол № 11 от «07» июня 2019 г.
Зав. кафедрой  /Мустафин А.Г.

Согласовано:
Председатель УМК химического факультета
 /Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

дисциплина
Квантовая химия

Обязательная часть

программа специалитета

Направление подготовки (специальность).
04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) подготовки
Аналитическая химия
Биоорганическая химия
Высокомолекулярные соединения
Неорганическая химия

Квалификация
Химик. Преподаватель химии

Разработчик (составитель)
профессор, д.х.н., доцент

 / Хайруллина В.Р.

Для приема: 2019 г.

Уфа 2019 г.

Составитель / составители: Хайруллина В.Р., д.х.н., доцент, профессор кафедры физической химии и химической экологии

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 11 от «07» июня 2019 г.

Заведующий кафедрой



_____ / Мустафин А.Г.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	4
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	4
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	5
4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.	5
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.	8
4.3. Рейтинг-план дисциплины	21
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	22
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	22
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы	23
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	24

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
Общепрофессиональные навыки	ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных Уметь: применять специализированное программное обеспечение при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных
		ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных Владеть: навыками применения специализированного программного обеспечения и баз данных при решении задач профессиональной сферы деятельности

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Квантовая химия» относится к вариативной части обязательного цикла ОП.

Дисциплина изучается на 4 курсе в 8 семестре.

Целью освоения дисциплины является подготовить студентов к пониманию языка современной квантовой химии, а также к самостоятельным компьютерным вычислениям электронного строения, пространственной структуры и физико-химических свойств различных молекулярных систем.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин: «Физика», «Математика», «Строение вещества», «Численные методы и программирование», «Персональные компьютеры в химии» «Информатика», «Общая химия», «Аналитическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия».

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и формулировка компетенции **ОПК-3** Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 («Неудовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных	Знает отдельные приемы работы с наиболее популярными специализированными программами, используемыми в химии и материаловедении, но затрудняется в их реализации	Знает основные приемы работы с наиболее популярными специализированными программами, используемыми в химии и материаловедении, но допускает отдельные неточности при их реализации	Знает основные приемы работы с наиболее популярными специализированными программами, используемыми в химии и материаловедении	Знает основные приемы работы со специализированными программами, используемыми в химии, материаловедении и смежных с ними областях знания
	Уметь: применять специализированное программное обеспечение при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных	Умеет использовать отдельные функции некоторых специализированных программ для обработки экспериментальных данных	Умеет применять специальное программное обеспечение при обработке экспериментальных данных и использовать некоторые	Умеет применять специальное программное обеспечение при обработке экспериментальных данных и использовать некоторые	Умеет использовать специализированное программное обеспечение для проведения теоретических расчетов и обработки экспериментальных данных при решении

	данных		специализированные пакеты программ в отдельно взятой области химии под руководством специалиста более высокой квалификации	специализированные пакеты программ в отдельно взятой области химии	задач профессиональной сферы деятельности
ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных	Знает отдельные приемы работы с наиболее популярными специализированными программами, используемыми в химии и материаловедении, но затрудняется в их реализации	Знает основные приемы работы с наиболее популярными специализированными программами, используемыми в химии и материаловедении, но допускает отдельные неточности при их реализации	Знает основные приемы работы с наиболее популярными специализированными программами, используемыми в химии и материаловедении	Знает основные приемы работы со специализированными программами, используемыми в химии, материаловедении и смежных с ними областях знания
	Владеть: навыками применения специализированного программного обеспечения и баз данных при решении задач профессиональной сферы деятельности	Владеет способностью использовать специализированное программное обеспечение только при непосредственном участии специалиста более высокой квалификации	Владеет способностью использовать специализированные базы данных и специальное программное обеспечение для решения отдельных задач под руководством специалиста более высокой	Владеет способностью самостоятельно использовать специализированные базы данных и специальное программное обеспечение для решения отдельных задач профессиональной сферы деятельности	Владеет способностью самостоятельно использовать специализированные базы данных и специальное программное обеспечение для поиска необходимой научно-технической информации, проведения расчетов,

			квалификации		обработки экспериментальных данных, подготовки научных публикаций и докладов
--	--	--	--------------	--	--

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных Уметь: применять специализированное программное обеспечение при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных	лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи
ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных Владеть: навыками применения специализированного программного обеспечения и баз данных при решении задач профессиональной сферы деятельности	

Вопросы к экзамену

1. Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии.
2. Основные этапы развития квантовой теории.
3. Главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной химической науки.
4. Математический аппарат квантовой механики.
5. Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения. Вырождение. Матричное представление операторов.
6. Разложение по собственным функциям эрмитова оператора. Коммутационные соотношения.
7. Соотношения неопределенностей. Физический смысл и простейшие оценки на их основе.
8. Основные постулаты квантовой механики.
9. Квантовые состояния и волновые функции; основные свойства волновых функций.
10. Операторы физических величин (наблюдаемых); средние значения и дисперсии наблюдаемых.
11. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве.
12. Операторы координат, импульсов, моментов импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан).
13. Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера.
14. Дискретный и непрерывный спектры. Уравнение непрерывности.
15. Простейшие примеры применения квантовой механики.
16. Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций.
17. Задачи о прямоугольном потенциальном ящике, потенциальном барьере и гармоническом осцилляторе.

18. Теория момента импульса. Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса.
19. Правила сложения моментов импульса. Жесткий ротатор.
20. Задача об атоме водорода. Разделение переменных.
21. Водородо-подобные орбитали, графическое представление их радиальных и угловых частей.
22. Вырождение одноэлектронных состояний как следствие симметрии центрального поля.
23. Приближенные методы решения квантово-механических задач.
24. Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие и при наличии вырождения.
25. Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод. Метод Ритца.
26. Молекула в постоянных электрическом и магнитном полях.
27. Дипольный электрический и магнитный моменты системы частиц.
28. Снятие вырождения под влиянием постоянного электрического или магнитного поля (эффекты Штарка и Зеемана.)
29. Спин элементарных частиц и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления.
30. Уравнение Шредингера для атомов и молекул.
31. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение.
32. Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле.
33. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение.
34. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока (самосогласованного поля, ССП). Детерминант Слэтера.
35. Понятие о закрытых и открытых оболочках. Уравнения, определяющие орбитали.
36. Орбитальные энергии и их связь с полной электронной энергией. Теорема Купманса и фотоэлектронные спектры.
37. Пределы применимости метода Хартри-Фока.
38. Электронное строение атомов. Электронные конфигурации и термы атомов.
39. Сложение моментов для атомов. Правила Хунда.
40. Электронное строение атомов и периодическая система элементов Д.И. Менделеева.
41. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).
42. Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа. Минимальные и валентно-расщепленные базисные наборы.
43. Поляризационные и диффузные функции. Метод ССП МО ЛКАО.
44. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ).
45. Роль представлений о ППЭ в современной структурной теории химии.
46. Равновесная конфигурация и конформации молекул. Стационарные точки ППЭ, их анализ. Простейшие примеры ППЭ.
47. Двухатомная молекула. Оптимизация геометрических характеристик молекулы.
48. ППЭ и химическая реакция, координата реакции.
49. Коррелированное движение электронов. Учет энергии электронной корреляции.
50. Понятие о методе конфигурационного взаимодействия.
51. Основные понятия метода теории возмущений, теория Меллера-Плессе.
52. Сравнительная характеристика методов конфигурационного взаимодействия и теории возмущений.

53. Полуэмпирические методы квантовой химии. Методы, использующие нулевое дифференциальное перекрытие.
54. Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии.
55. Учет симметрии ядерной конфигурации при рассмотрении электронной задачи.
56. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии.
57. Наиболее распространенные программные комплексы (AMPAC, MOPAC, GAMESS).
58. Подготовка исходного файла. Ключевые слова как способ управления расчетом.
59. Составление Z-матрицы. Базисные атомы. Определение начального приближения геометрических параметров молекулы.
60. Учет симметрии при задании начального приближения. Z-матрица стиля MOPAC и GAUSSIAN.
61. Основные результаты квантовохимических расчетов. Визуализация результатов расчета.

Структура экзаменационного билета. Экзаменационный билет состоит из двух теоретических вопросов и из одной задачи, включенных в программу дисциплины. Каждый вопрос и задача оценивается 10-ю баллами. Таким образом, максимальный балл, который можно получить на экзамене, составляет 30 баллов. Баллы, полученные при сдаче экзамена, суммируются с баллами, полученными в ходе семестра.

Образец экзаменационного билета

МИНОБРНАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет
Кафедра физической химии и химической экологии

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

по дисциплине Квантовая химия
Направление 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»
Направленность «Физическая химия»

1. Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии.
2. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение.
3. Определите результат действия оператора $A = d/dx$ на функцию $f = \sin x$

Утверждено на заседании кафедры 01.06.2018, протокол № 11

Заведующий кафедрой физической химии
и химической экологии БашГУ, проф.

А.Г. Мустафин

2019-2020 уч. г. Кафедра ФХ и ХЭ

Критерии оценки (в баллах):

- **25-30 баллов** выставляется студенту, если студент дал полные, развернутые ответы на все теоретические вопросы билета, продемонстрировал знание функциональных возможностей, терминологии, основных элементов, умение применять теоретические знания при выполнении практических заданий. Студент без затруднений ответил на все

дополнительные вопросы. Практическая часть работы выполнена полностью без неточностей и ошибок;

- **17-24 баллов** выставляется студенту, если студент раскрыл в основном теоретические вопросы, однако допущены неточности в определении основных понятий. При ответе на дополнительные вопросы допущены небольшие неточности. При выполнении практической части работы допущены несущественные ошибки;

- **10-16** баллов выставляется студенту, если при ответе на теоретические вопросы студентом допущено несколько существенных ошибок в толковании основных понятий. Логика и полнота ответа страдают заметными изъянами. Заметны пробелы в знании основных методов. Теоретические вопросы в целом изложены достаточно, но с пропусками материала. Имеются принципиальные ошибки в логике построения ответа на вопрос. Студент не решил задачу или при решении допущены грубые ошибки;

- **1-10** баллов выставляется студенту, если ответ на теоретические вопросы свидетельствует о непонимании и крайне неполном знании основных понятий и методов. Обнаруживается отсутствие навыков применения теоретических знаний при выполнении практических заданий. Студент не смог ответить ни на один дополнительный вопрос.

ПРОГРАММА ГРУППОВЫХ ЗАНЯТИЙ

Раздел 1. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Основные постулаты квантовой механики. Квантовые состояния и волновые функции; основные свойства волновых функций. Операторы физических величин (наблюдаемых); средние значения и дисперсии наблюдаемых. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве.

Математический аппарат квантовой механики. Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения. Вырождение. Матричное представление операторов. Разложение по собственным функциям эрмитова оператора. Коммутационные соотношения.

Операторы координат, импульсов, моментов импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан).

Соотношения неопределенностей. Физический смысл и простейшие оценки на их основе.

Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера. Дискретный и непрерывный спектры. Уравнение непрерывности.

Простейшие примеры применения квантовой механики. Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций. Задачи о прямоугольном потенциальном ящике, потенциальном барьере и гармоническом осцилляторе.

Теория момента импульса. Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса. Правила сложения моментов импульса. Жесткий ротатор.

Задача об атоме водорода. Разделение переменных. Водородо-подобные орбитали, графическое представление их радиальных и угловых частей. Вырождение одноэлектронных состояний как следствие симметрии центрального поля.

Приближенные методы решения квантово-механических задач. Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие и при наличии вырождения. Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод. Метод Рунге.

Молекула в постоянных электрическом и магнитном полях. Дипольный электрический и магнитный моменты системы частиц. Снятие вырождения под влиянием постоянного электрического или магнитного поля (эффекты Штарка и Зеемана.)

Спин элементарных частиц и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления.

Квантовая система в переменном электромагнитном поле. Временная теория возмущений. Переходы под влиянием излучения и правила отбора. Коэффициенты Эйнштейна.

Системы тождественных частиц: фермионы и бозоны. Антисимметричность волновой функции для системы электронов. Представление волновой функции системы электронов в виде определителя.

Раздел 2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ И МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

I. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии. Роль представлений о поверхности потенциальной энергии в современной структурной теории химии. Равновесная конфигурация и конформации молекул. Малые колебания ядер вблизи положения равновесия. Колебания с большими амплитудами. Вращение системы ядер как целого.

Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле.

Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри - Фока (самосогласованного поля, ССП). Уравнения, определяющие орбитали. Орбитальные энергии и их связь с полной электронной энергией. Теорема Купманса и фотоэлектронные спектры. Пределы применимости метода Хартри-Фока.

Понятие о методе конфигурационного взаимодействия. Метод валентных схем.

Электронное строение атомов. Электронные конфигурации и термы атомов. Сложение моментов для атомов. Правила Хунда. Электронное строение атомов и периодическая система элементов Д.И. Менделеева.

Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа. Метод ССП МО ЛКАО.

Представление о методах функционала электронной плотности.

II. Учет симметрии ядерной конфигурации при рассмотрении электронной задачи. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Представления точечных групп, неприводимые представления и таблицы характеров.

Симметрия и свойства молекул. Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии. σ - и π -Орбитали. π -Электронное приближение. Орбитали симметрии и эквивалентные орбитали.

Связывающие и разрыхляющие орбитали.

Локализованные молекулярные орбитали, натуральные связывающие орбитали и классические представления о химической связи. Групповые орбитали. Переносимость орбиталей фрагментов молекул. Связевые орбитали и орбитали неподеленных пар.

Гибридизация и гибридные орбитали в базисе атомных s-, p- и d-орбиталей.

III. Полуэмпирические методы квантовой химии. Методы, использующие нулевое дифференциальное перекрытие. Расширенный метод Хюккеля. Метод Хюккеля для π -электронных систем. Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии.

IV. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии. Ориентационная и индукционная составляющие. Дисперсионное взаимодействие. Ван-дер-Ваальсовы комплексы. Водородная связь.

V. Нежесткие молекулы. Электронно-колебательное взаимодействие. Эффекты Яна-Теллера.

VI. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Наиболее распространенные программные комплексы (MOPAC, GAUSSIAN и др.).

Раздел 3. ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

I. Двухатомные молекулы. Простейшие модели описания на основе методов молекулярных орбиталей и валентных схем. Анализ волновых функций молекулярного иона

и молекулы водорода. Сопоставление результатов расчетов H_2^+ и H_2 . Корреляционные диаграммы МО для двухатомных молекул. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах, образованных атомами второго периода. Полярность химической связи и её характеристики

II. Качественный анализ геометрического строения малых многоатомных молекул на основе метода МО. Диаграммы Уолша.

III. Координационные соединения. Теория кристаллического поля. Анализ расщепления атомных d- и f-уровней в полях различной симметрии. Параметры расщепления. Сильное и слабое поле лигандов. Анализ электронных спектров и магнитных свойств комплексов на основе теории кристаллического поля.

Теория поля лигандов. Интерпретация транс- и цис-влияния в комплексах переходных и непереходных металлов. Изолобальная аналогия.

IV. Органические соединения. Приближения, используемые при расчетах и при интерпретации электронного строения органических соединений. Близость свойств соединений в гомологических рядах и переносимость орбиталей локальных фрагментов молекул. Заряды на атомах и порядки связей по Малликену и Лёвдину. Корреляция между параметрами геометрического строения и порядками связей. Принципы построения аддитивных схем расчета свойств молекул в рядах.

Перенос заряда при образовании химических соединений. Комплексы с переносом заряда.

Сопряженные соединения. Ароматичность и антиароматичность. Правила $4n$ и $4n+2$. Альтернантные углеводороды. Правило Лонге-Хиггинса. Метод свободного электрона для анализа свойств и поведения сопряженных соединений.

V. Качественная теория реакционной способности органических соединений. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации. Концепция жестких и мягких кислот и оснований. Электростатическое поле, создаваемое молекулой, и его влияние на реакционную способность.

Квантово химическое описание элементарного акта химических реакций. Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности. Переходное состояние. Симметрия реагентов, переходного состояния и продуктов реакции.

Качественный анализ возможных механизмов химических реакций на основе общей структуры потенциальной поверхности. Корреляционные правила Вудворда - Хофмана при анализе возможных механизмов химических реакций. Теория граничных орбиталей Фукуи. Принцип Бэлла - Эванса - Поляни. Ограничения подходов, использующих представления о движении по потенциальной поверхности. Роль туннелирования в химических реакциях.

П Л А Н

Устного опроса по курсу

1. Эрмитовы операторы в конечномерных пространствах. Собственные векторы и собственные значения эрмитовых матриц 2-го и 3-го порядков. Ортогональность собственных векторов. Разложение произвольного вектора по собственным векторам эрмитова оператора.

2. Нахождение собственных значений и собственных функций операторов квантовой механики, например операторов p_x , p_x^2 , $p_x^2 + x^2$, операторов момента импульса и др.

3. Задачи об одномерных и трехмерных потенциальных ящиках с прямоугольными потенциалами и стенками различной высоты. Прямоугольные потенциальные барьеры.

4. Задача об атоме водорода. Выделение центра масс, переход к сферической системе координат. Форма атомных орбиталей.

5. Формулы теории возмущений на примере линейных операторов (матриц) в двумерном и трехмерном пространствах. Сравнение с вариационным подходом при использовании в качестве базиса собственных векторов невозмущенного оператора.

6. Эффекты Штарка и Зеемана для простых модельных систем.

7. Оператор Гамильтона для атомных и молекулярных систем (на простых примерах: атом С, молекулы LiH, BeH₂ и др.). Построение электронной волновой функции в виде определителя.

8. Молекулы H₂⁺ и H₂. Простейшие подходы к построению волновых функций и потенциальных кривых.

9. Уравнения метода Хартри - Фока для простейших молекул, например LiH.

10. Точечные группы симметрии. Неприводимые представления на примере групп типа C_{2v}, C_{3v} и т.п. Характеры представлений. Разложение приводимого представления на неприводимое. Прямое произведение представлений. Правила отбора для электронных переходов. (2 семинара).

11. Учет симметрии при классификации орбиталей. σ- и π-Орбитали. Гибридные и эквивалентные орбитали. Корреляционные диаграммы.

12. Метод Хюккеля. Простейшие примеры расчетов. Заряды на атомах, порядки связей. Граничные орбитали. Правило Лонге-Хиггинса. (2 семинара).

13. Корреляционные диаграммы и корреляционные правила при качественном описании механизмов химических реакций (например, правила Вудворда - Хофмана о сохранении орбитальной симметрии или теория граничных орбиталей Фукуи). (2 семинара)

14. Спектры и строение комплексных соединений d- и f-элементов в приближении теории кристаллического поля.

Критерии и методика оценивания результатов устного опроса:

Один вопрос (33 вопроса).

- 0,5 балла выставляется студенту, если ответ правильный;

- 0 баллов выставляется студенту, если ответ неправильный.

П Л А Н

Лабораторных занятий по курсу

Лабораторное занятие 1.

Воспользовавшись программой GAMESS, создайте пространственное изображение молекулы метилхлорида. Проведите оптимизацию ее геометрических параметров методом AM1. Выпишите в таблицу значения ее длин связей, валентных углов. Проведите оптимизацию геометрии молекулы квантовохимическим методом RHF/STO-3G. Полученные значения также выпишите в таблицу. Результаты оптимизаций сравните с экспериментальными данными, найденными при изучении литературы (см. Справочник химика, т. 1. и др.).

Проанализируйте отдельные характеристики электронной структуры заданной молекулярной системы: энергии и состав МО, энергетическую диаграмму, энергию связывания, энергию ионизации, эффективные заряды атомов. Результаты расчета там, где это возможно, сопоставите с экспериментальными данными. Сформулируйте выводы.

Лабораторное занятие 2.

Воспользовавшись программой GAMESS, создайте пространственное изображение молекулы этанола. Проведите оптимизацию ее геометрических параметров методом B3LYP/6-31G(d). Выпишите в таблицу значения ее длин связей, валентных углов. Проведите реоптимизацию геометрии молекулы методом RHF/6-31G(d). Полученные значения также выпишите в таблицу. Результаты оптимизаций сравните с экспери-

ментальными данными, найденными при изучении литературы (см. Справочник химика, т. 1. др.).

Проанализируйте отдельные характеристики электронной структуры заданной молекулярной системы: энергии и состав МО, энергетическую диаграмму, энергию связывания, энергию ионизации, эффективные заряды атомов. Результаты расчета там, где это возможно, сопоставьте с экспериментальными данными. Сформулируйте выводы.

Лабораторное занятие 3.

Воспользовавшись программой GAMESS, создайте пространственное изображение молекулы диметилового эфира. Проведите оптимизацию ее геометрических параметров методом RHF/6-31G(d). Выпишите в таблицу значения ее длин связей, валентных углов. Проведите реоптимизацию геометрии молекулы методом MP2/6-31G(d). Полученные значения также выпишите в таблицу. Результаты оптимизаций сравните с экспериментальными данными, найденными при изучении литературы (см. Справочник химика, т. 1. др.).

Проанализируйте отдельные характеристики электронной структуры заданной молекулярной системы: энергии и состав МО, энергетическую диаграмму, энергию связывания, энергию ионизации, эффективные заряды атомов. Результаты расчета там, где это возможно, сопоставьте с экспериментальными данными. Сформулируйте выводы.

Лабораторное занятие 4.

Воспользовавшись программой GAMESS, создайте пространственное изображение молекулы ацетона. Проведите оптимизацию ее геометрических параметров методом RHF/STO-3G. Выпишите в таблицу значения ее длин связей, валентных углов. Проведите реоптимизацию геометрии молекулы методом RHF/6-31G(d). Полученные значения также выпишите в таблицу. Результаты оптимизаций сравните с экспериментальными данными, найденными при изучении литературы (см. Справочник химика, т. 1. др.).

Проанализируйте отдельные характеристики электронной структуры заданной молекулярной системы: энергии и состав МО, энергетическую диаграмму, энергию связывания, энергию ионизации, эффективные заряды атомов. Результаты расчета там, где это возможно, сопоставьте с экспериментальными данными. Сформулируйте выводы.

Лабораторное занятие 5.

Воспользовавшись программой GAMESS, создайте пространственное изображение молекулы триметиламина. Проведите оптимизацию ее геометрических параметров методом V3PW91/6-31G(d). Выпишите в таблицу значения ее длин связей, валентных углов. Проведите реоптимизацию геометрии молекулы методом RHF/6-31G(d). Полученные значения также выпишите в таблицу. Результаты оптимизаций сравните с экспериментальными данными, найденными при изучении литературы (см. Справочник химика, т. 1. др.).

Проанализируйте отдельные характеристики электронной структура, заданной молекулярной системы: энергии и состав МО, энергетическую диаграмму, энергию связывания, энергию ионизации, эффективные заряды атомов. Результаты расчета там, где это возможно, сопоставьте с экспериментальными данными. Сформулируйте выводы.

Лабораторное занятие 6.

Воспользовавшись программой GAMESS, создайте пространственное изображение гидразина. Проведите оптимизацию ее геометрических параметров методом V3LYP/6-31G(d). Выпишите в таблицу значения ее длин связей, валентных углов. Проведите реоптимизацию геометрии молекулы методом RHF/6-311G(d). Полученные значения также выпишите в таблицу. Результаты оптимизаций сравните с экспериментальными данными, найденными при изучении литературы (см. Справочник химика, т. 1. др.).

Проанализируйте отдельные характеристики электронной структуры заданной молекулярной системы: энергии и состав МО, энергетическую диаграмму, энергию связывания, энергию ионизации, эффективные заряды атомов. Результаты расчета там, где это возможно, сопоставьте с экспериментальными данными. Сформулируйте выводы.

Лабораторное занятие 7.

Воспользовавшись программой GAMESS, создайте пространственное изображение молекулы дихлорсилана. Проведите оптимизацию ее геометрических параметров методом RHF/6-31G(d). Выпишите в таблицу значения ее длин связей, валентных углов. Проведите реоптимизацию геометрии молекулы методом B3LYP/6-31G(d). Полученные значения также выпишите в таблицу. Результаты оптимизаций сравните с экспериментальными данными, найденными при изучении литературы (см. Справочник химика, т. 1. др.).

Проанализируйте отдельные характеристики электронной структуры заданной молекулярной системы: энергии и состав МО, энергетическую диаграмму, энергию связывания, энергию ионизации, эффективные заряды атомов. Результаты расчета там, где это возможно, сопоставьте с экспериментальными данными. Сформулируйте выводы.

Лабораторное занятие 8.

Воспользовавшись программой GAMESS, создайте пространственное изображение молекулы диоксида серы. Проведите оптимизацию ее геометрических параметров методом RHF/6-311G(d). Выпишите в таблицу значения ее длин связей, валентных углов. Проведите реоптимизацию геометрии молекулы методом B3LYP/6-311G(d). Полученные значения также выпишите в таблицу. Результаты оптимизаций сравните с экспериментальными данными, найденными при изучении литературы (см. Справочник химика, т. 1. др.).

Проанализируйте отдельные характеристики электронной структуры заданной молекулярной системы: энергии и состав МО, энергетическую диаграмму, энергию связывания, энергию ионизации, эффективные заряды атомов. Результаты расчета там, где это возможно, сопоставьте с экспериментальными данными. Сформулируйте выводы.

Лабораторное занятие 9.

Воспользовавшись программой GAMESS, создайте пространственное изображение молекулы фосфина. Проведите оптимизацию ее геометрических параметров методом RHF/6-31G(d). Выпишите в таблицу значения ее длин связей, валентных углов. Проведите реоптимизацию геометрии молекулы методом B3LYP/6-31G(d). Полученные значения также выпишите в таблицу. Результаты оптимизаций сравните с экспериментальными данными, найденными при изучении литературы (см. Справочник химика, т. 1. др.).

Проанализируйте отдельные характеристики электронной структуры заданной молекулярной системы: энергии и состав МО, энергетическую диаграмму, энергию связывания, энергию ионизации, эффективные заряды атомов. Результаты расчета там, где это возможно, сопоставьте с экспериментальными данными. Сформулируйте выводы.

Лабораторное занятие 10.

Воспользовавшись программой GAMESS, создайте пространственное изображение молекулы диборана. Проведите оптимизацию ее геометрических параметров методом RHF/6-31G(d). Выпишите в таблицу значения ее длин связей, валентных углов. Проведите реоптимизацию геометрии молекулы методом B3LYP/6-31G(d). Полученные значения также выпишите в таблицу. Результаты оптимизаций сравните с экспериментальными данными, найденными при изучении литературы (см. Справочник химика, т. 1. др.).

Проанализируйте отдельные характеристики электронной структуры заданной молекулярной системы: энергии и состав МО, энергетическую диаграмму, энергию

связывания, энергию ионизации, эффективные заряды атомов. Результаты расчета там, где это возможно, сопоставьте с экспериментальными данными. Сформулируйте выводы.

Лабораторное занятие 11.

Воспользовавшись программой GAMESS, создайте пространственное изображение молекулы пероксида водорода. Проведите оптимизацию ее геометрических параметров методом B3LYP/6-311G(d,p). Выпишите в таблицу значения ее длин связей, валентных углов. Проведите реоптимизацию геометрии молекулы методом MP2/6-311+G(d,p). Полученные значения также выпишите в таблицу. Результаты оптимизаций сравните с экспериментальными данными, найденными при изучении литературы (см. Справочник химика, т. 1. др.).

Проанализируйте отдельные характеристики электронной структуры заданной молекулярной системы: энергии и состав МО, энергетическую диаграмму, энергию связывания, энергию ионизации, эффективные заряды атомов. Результаты расчета там, где это возможно, сопоставьте с экспериментальными данными. Сформулируйте выводы.

ПЕРЕЧЕНЬ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ, ЗАЛОЖЕННЫХ В КОНТРОЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ:

Вариант	Молекула	Примечание
1	CH ₃ Cl	Экспериментальные данные по всем молекулам см.: Справочник химика, т. 1 М.-Л.: Химия, 1964
2	C ₂ H ₅ OH	
3	CH ₃ OCH ₃	
4	CH ₃ COCH ₃	
5	(CH ₃) ₃ N	
6	N ₂ H ₄	
7	SiH ₂ Cl ₂	
8	SO ₂	
9	PH ₃	
10	B ₂ H ₆	
11	H ₂ O ₂	

Критерии оценки лабораторных работ

2,5 балла: Задание по работе выполнено в полном объеме. Студент точно ответил на контрольные вопросы, свободно ориентируется в предложенном решении, может его модифицировать при изменении условия задачи. Отчет выполнен аккуратно и в соответствии с предъявляемыми требованиями.

2 балла: Задание по работе выполнено в полном объеме. Студент ответил на теоретические вопросы, испытывая небольшие затруднения. Качество оформления отчета к работе не полностью соответствует требованиям.

1,5 балла (удовлетворительно): Студент правильно выполнил задание к работе. Составил отчет в установленной форме, представил решения большинства заданий, предусмотренных в работе. Студент не может полностью объяснить полученные результаты.

1 балл: Студент неправильно выполнил от 70% до 50% заданий работы и не может объяснить полученные результаты.

0,5 балла: Студент неправильно выполнил свыше 70% заданий работы и не может объяснить полученные результаты.

0 баллов Студент не выполнил все задания работы и не может объяснить полученные результаты

Темы рефератов

1. Место квантовой химии среди других наук
2. Электродинамическая картина мира
3. Квантово-полевая картина мира
4. «Ультрафиолетовая катастрофа»
5. История развития квантовой химии
6. Опыт Резерфорда. Ядерная модель атома
7. Квантовые постулаты Бора
8. Волновые свойства микрочастиц. Гипотеза де Бройля.
9. Дальнейшее развитие квантовой механики.
10. Матричная механика. Работы Гейзенберга.
11. Основные квантово-механические принципы
12. Волны и вероятности.
13. Основные положения современной квантовой механики.
14. Принцип неопределённости Гейзенберга
15. Уравнение Шредингера
16. Прикладной характер квантовой химии
17. Будущее квантовой химии
18. Биография. де Бройля, Бора, Шредингера, Гейзенберга

- Критерии оценки (в баллах) рефератов:

Написание реферата следует начать с изложения плана темы, который как минимум включает 3 пункта. План должен быть логично изложен и должен включать в себя введение и заключение.

Реферат завершается списком использованной литературы.

Задачи студента при написании реферата заключаются в следующем:

1. логично и по существу изложить вопросы плана;
2. четко сформулировать мысли, последовательно и ясно изложить материал, правильно использовать термины и понятия;
3. показать умение применять теоретические знания на практике;
4. показать знание материала, рекомендованного по теме;
5. использовать для экономического обоснования необходимый статистический материал.

Реферат оценивается преподавателем кафедры по следующим критериям.

Объем реферата должен быть не менее 12-18 стр. машинописного текста (аналог – компьютерный текст Time New Roman, размер шрифта 14 через полтора интервала), включая титульный лист.

При оценке уровня выполнения реферата, в соответствии с поставленными целями для данного вида учебной деятельности, могут контролироваться следующие умения, навыки и компетенции:

- умение работать с объектами изучения, критическими источниками, справочной и энциклопедической литературой;
- умение собирать и систематизировать практический материал;
- умение самостоятельно осмысливать проблему на основе существующих методик;
- умение логично и грамотно излагать собственные умозаключения и выводы;
- умение соблюдать форму научного исследования;
- умение пользоваться глобальными информационными ресурсами;
- владение современными средствами телекоммуникаций;
- способность и готовность к использованию основных прикладных программных средств;

- способность создать содержательную презентацию выполненной работы.

Критерии оценки рефератов (в баллах)

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом вопросе;
- 1 балл выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует незнание теоретических основ предмета, не умеет делать аргументированные выводы и приводить примеры, почти не владеет монологической речью, не владеет терминологией, проявляет отсутствие логичности и последовательностью изложения, делает ошибки, которые не может исправить даже при коррекции преподавателем, отказывается отвечать на занятии);
- 2 балла выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует незнание теоретических основ предмета, не умеет делать аргументированные выводы и приводить примеры, показывает слабое владение монологической речью, не владеет терминологией, проявляет отсутствие логичности и последовательностью изложения, делает ошибки, которые не может исправить даже при коррекции преподавателем, отказывается отвечать на занятии);
- 3 балла выставляется студенту, если студент имеет не в достаточной мере сформированные и содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует неглубокие теоретические знания, проявляет слабо сформированные навыки анализа явлений и процессов, недостаточное умение делать аргументированные выводы и приводить примеры, показывает не достаточно свободное владение монологической речью, терминологией, логичностью и последовательностью изложения, делает ошибки, которые может исправить только при коррекции преподавателем);
- 4 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует прочные теоретические знания, владеет терминологией, делает аргументированные выводы и обобщения, приводит примеры, показывает свободное владение монологической речью, но при этом делает несущественные ошибки, которые быстро исправляет самостоятельно или при незначительной коррекции преподавателем);
- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует системные теоретические знания, владеет терминологией, делает аргументированные выводы и обобщения, приводит примеры, показывает свободное владение монологической речью и способность быстро реагировать на уточняющие вопросы).

Тестирование

- 1) Какое приближение используется для решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов?
А) Борна-Оппенгеймера;
Б) независимых частиц;
В) молекулярных орбиталей;
Г) валентная аппроксимация.

- 2) Какое приближение используется для решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов?
А) релятивистскую и нерелятивистскую;
Б) Шредингера и де Бройля;
В) волновую и корпускулярную;
Г) атомную и молекулярную;
Д) твёрдого тела и жидкостей.

- 3) В квантовой механике выделяют две основные идеи:
 А) волновой природы света и корпускулярной природы вещества;
 Б) корпускулярно-волнового дуализма и дискретность изменения физических величин;
 В) волновой природы вещества и корпускулярной природы света;
 Г) непрерывности и дискретности изменения физических величин;
 Д) деления микрочастиц на фермионы и бозоны и неустранимость влияния измерительного прибора на состояние исследуемого объекта.
- 4) Потенциальная энергия атома к электрону можно приближенно охарактеризовать энергией
 А) Нижней вакантной атомной орбитали (НВАО);
 Б) Верхней вакантной атомной орбитали (ВВАО);
 В) Нижней занятой атомной орбитали (НЗАО);
 Г) Верхней занятой атомной орбитали (ВЗАО).
- 5) Выберите верное утверждение. Если $\{E_i\}$ — набор собственных значений гамильтониана H в уравнении $H\Psi_i = E_i\Psi_i$, то ...
 А) -энергия системы в i -состоянии;
 Б) - энергия системы, а при $i > 0$ не имеют физического смысла;
 В) - полная энергия системы;
 Г) - полная энергия системы;
 Д) - для любых i и j .

Критерии и методика оценивания результатов тестирования:

Один тестовый вопрос (30 вопросов).

- 0,333 балла выставляется студенту, если ответ правильный;

- 0 баллов выставляется студенту, если ответ неправильный.

Комплект заданий для контрольной работы № 1 по дисциплине Квантовая химия

Вариант 1

1. Найдите собственное значение оператора $\frac{d^2}{dx^2}$, если $f(x) = 15 \sin\left(\frac{n\pi}{3}x\right)$.
2. Решите уравнение сферической гармоники для водородоподобного атома N при условии, что $l=2$, $m=1$.
3. Определите радиальную часть волновой функции водородоподобного атома для случая $n=3$, $l=2$.

Вариант 2

1. Найдите собственное значение оператора $\frac{d^2}{dx^2}$, если $f(x) = 5 \cos\left(\frac{n\pi}{6}x\right)$.
2. Решите уравнение сферической гармоники для водородоподобного атома N при условии, что $l=2$, $m=-1$.
3. Определите радиальную часть волновой функции водородоподобного атома для случая $n=2$, $l=1$.

- Критерии и методика оценивания результатов контрольных работ

- 10 баллов выставляется студенту, если работа выполнена в полном объеме и изложена грамотным языком в определенной логической последовательности с точным использованием специализированной терминологии; показано уверенное владение нормативной базой;

- 8-9 баллов выставляется студенту, если работа выполнена в полном объеме, но имеет один из недостатков:

в работе допущены один-два недочета при освещении основного содержания ответа; нет определенной логической последовательности, неточно используется специализированная терминология;

- 6-7 баллов выставляется студенту, если работа выполнена неполно, не показано общее понимание вопроса, имелись затруднения или допущены ошибки в определении понятий, использовании терминологии, при знании теоретического материала выявлена недостаточная сформированность основных умений и навыков.

- 4-5 баллов выставляется студенту, если студент выполнил контрольную работу менее чем на 50 %.

- 1-3 балла выставляется студенту, если студент выполнил контрольную работу менее чем на 70 %.

- 0 баллов выставляется студенту, если студент вообще не приступал к выполнению контрольной работы.

4.3. Рейтинг-план дисциплины

Рейтинг–план дисциплины представлен в Приложении 2.

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей дисциплины, перечисленных в рейтинг-плане дисциплины, для экзамена: текущий контроль – максимум 40 баллов; рубежный контроль – максимум 30 баллов, поощрительные баллы – максимум 10.

Перевод оценки из 100-балльной в четырехбалльную производится следующим образом:

- отлично – от 80 до 110 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- хорошо – от 60 до 79 баллов;
- удовлетворительно – от 45 до 59 баллов;
- неудовлетворительно – менее 45 баллов.

Виды самостоятельной работы:

- изучение основной и дополнительной литературы в целях самоподготовки;
- конспектирование материалов научной и учебной литературы по указанию преподавателя;
- решение тестов по заданию преподавателя;
- подготовка к занятиям, проводимым в интерактивной форме;
- написание реферата по заданию преподавателя.

Формы текущего контроля:

- проверка лабораторных работ
- устный опрос на лабораторных занятиях
- решение типовых задач

Форма рубежного контроля – тестирование, письменная контрольная работа.

Формы промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины – экзамен.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература:

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 428 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/92941>. — Загл. с экрана.
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по химич. спец. / В. И. Барановский .— М. : Академия, 2008 .— 383 с. — (Высшее профессиональное образование) .— Режим доступа: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+2+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>.
3. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учебное пособие / Майер И. ; под ред. А. Л. Чугреева ; пер. с англ. М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 387 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/94102>. — Загл. с экрана.
4. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.Г. Цирельсон. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/94104>. — Загл. с экрана. Киселёв В. В. / Квантовая механика. Курс лекций / М.: МЦНМО, 2009. - 560 с.
5. Демидович, Б.П. Математические основы квантовой механики [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.П. Демидович. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2005. — 200 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/604>. — Загл. с экрана.
6. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] / В.И. Крашенинин ; Е.Г. Газенаур ; Л.В. Кузьмина .— Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012 .— 56 с. — Режим доступа: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+9+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>>.
7. Квантовохимическое моделирование органических молекул и реакций. Выбор приближения. [Электронный ресурс]: учеб. пособие / И.В. Вакулин [и др.]; Башкирский государственный университет. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2015. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Электронная библиотека БашГУ»: — <URL:https://elib.bashedu.ru/dl/read/Vakulin_Latypova_Talipov_Kvantovohimicheskoe_modelirovanie_up_2015.pdf>.

Дополнительная литература:

8. Хурсан С.Л. Методические указания для семинарских и практических занятий по курсу "Квантовая механика и квантовая химия"(раздел "Квантовая механика" : Учебное пособие / С.Л.Хурсан, Уч.-науч.комплекс "Интеграция" .— Уфа : Реактив, 2000 .— 43с. :

- ил. — Обяз.экз. — ISBN 5883330681 (Беспл.). <URL: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+default+7+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.
9. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по спец. ВПО 020101.65 "Химия" / А. И. Ермаков. — М. : Юрайт, 2010. — 555 с. — (Основы наук). — ISBN 978-5-9916-0587-8. — ISBN 978-5-9692-0331-0. <URL: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+rs2+14+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.
 10. Шпольский, Э.В. Атомная физика. Том 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома [Электронный ресурс] : учебник / Э.В. Шпольский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2010. — 448 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/443>. — Загл. с экрана.
 11. Степанов Н.Ф. «Квантовая химия и квантовая механика» : учеб. пособие / Н. Ф. Степанов, В. И. Пупышев. — М. : МГУ, 1991. — 384 с. : ил. — ISBN 5-211-01629-7. <URL: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+default+1+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.
 12. Задачи по квантовой теории [Электронный ресурс]: методические указания к проведению практических занятий по квантовой теории: Ч.2 / Башкирский государственный университет; сост. Р.М. Вахитов. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2017. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Электронная библиотека БашГУ»: . — <URL:https://elib.bashedu.ru/dl/local/Vahitov_sost_Zadachi_po_kvantovoj_teorii_mu_Ch2_mu_2017.pdf>.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Университет обеспечен необходимым комплектом лицензионного программного обеспечения дисциплин (модулей).

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>
3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalogi/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
9. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019
10. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License.
11. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU.

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий	Вид занятий	Наименование оборудования, программного обеспечения
<p>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус).</p> <p>2.учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа: аудитория № 004 (химфак корпус), аудитория № 005 (химфак корпус).</p> <p>3. учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008(химфак корпус)</p> <p>4. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008(химфак корпус), аудитория № 004 (химфак корпус), аудитория № 005 (химфак корпус).</p>	<p>Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см SpectraClassic.</p> <p>Аудитория № 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Mattewhite.</p> <p>Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p> <p>Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p> <p>Аудитория № 004 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G, персональный компьютер Lenovo ThinkCentre A70z Intel Pentium E 5800, 320 Gb, 19" - 15 шт, шкаф настенный TLK6U.</p> <p>Аудитория № 005 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, компьютер DEPONeos 470 MDi5_3450/4GDDR/T500 G/DVD+R и монитор ViewSonic 21.5 - 13 шт, шкаф TLK TWP-065442-G-GY, шкаф монтажный NT PRACTIC 2MP47-610B/SSt450/ SKS1/SSt750,59560, 00 T.316-14, шкаф настенный TLK6U.</p> <p>Аудитория № 001 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 002 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 006 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 007 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 008 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Читальный зал № 1 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.</p> <p>Читальный зал №2 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.</p> <p>Читальный зал № 5 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.</p> <p>Читальный зал № 6 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК</p>	<p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные</p> <p>2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> <p>3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019</p> <p>4. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU</p> <p>5. LinuxOpenSUSE 12.3 (x84_64) GNUGeneralPublicLicense</p>

<p>5. помещения для самостоятельной работы: читальный зал №1 (главный корпус), читальный зал №2 (физмат корпус-учебное), читальный зал №5 (гуманитарный корпус), читальный зал №6 (учебный корпус), читальный зал №7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 418 (химфак корпус)</p>	<p>(моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.</p>	
<p>6. помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования: лаборатория № 416 (химфак корпус).</p>	<p>Читальный зал № 7 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.</p>	
	<p>Лаборатория № 418 Учебная мебель, факсимильным аппарат Panasonic KX-FL423RUB – 2 шт., эН-метр рН-150МИ (с гос. поверкой), автотрансформатор TDGC2-0.5К(0,5кВТ; 2А,220/0-250В),3604, 99р Т.207/2-15, весы "Ohaus" PA64С (65г, 0,1мг) с поверкой, весы VIC-1500d1 (1500г. 100МГ, внешн.калибровка) ACCULAB, иономер И-160МИ с поверкой, комплекс вольтамперометрический СТА, компьютер в комплекте DEPO Neos 4601\Ю/монитор 20" Samsung VX2035/кпав./мышь, компьютер персональный №1 т.210-14/3, магнитная мешалка без нагрева Tolorino – 2шт, магнитная мешалка с нагревом и нанокерамич.поверх hG-MAG HS, метр-рН рН-150МИ (с гос.поверкой), монитор 19" LG L1919S BF Black (LCD<TFT,8ms, 1280*1024,250КД/М.1 400:1,4:3 D-Sub), персональный компьютер в составе с/блок/Core J7-4770 (3.4)/H87/SYGA/HDD 500Gb, монитор ЖК"20"Веpl.клавиат ура+мышь, принтер Canoni-SENSYSMF3010, рН-метр рН-150МИ с гос.поверкой, системный блок ПК (775), шкаф сушильный LOIPLF-25/350-GS1, (310X 310x310 мм б/вентилятора.нерж.сталь цифровой контролер), количество посадочных мест – 10.</p>	
	<p>Лаборатория № 416 Атомно-абсорбционный спектрофотометр модель AA-7000, фирмы "Шимадзу", Япония, баллон с гелием марки А – 2 шт, вентилятор ВЕНТС 100 ВКМц/*1/, газовый хромато-масс-спектрометр модель GCMS-QP 2010PIUS, компьютер в составе: системный блок, монитор, клавиатура, мышь, кондиционер QUATTROCUMA QV/QN-F12WA, ноутбук FujitsuLifebookKF530 IntelCorei3-330M/4Gb/500Gb/ DVD-RW/ВТ/15.6"/Win7НВ+office, персональный компьютер в комплекте HP AiO 20"CQ 100 eu (моноблок), электроплитка Irit IR-8200,1500Вт диаметр конфорки 185мм.</p>	

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ
дисциплины Квантовая химия на 8 семестр
очная форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	3/108
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	77,2
лекций	32
практических/ семинарских	-
лабораторных	44
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	1,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	5
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	25,8

Форма(ы) контроля:

Экзамен в 8 семестре

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СРС			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	<p>Предмет квантовой механики. Основные этапы развития квантовой теории.</p> <p>Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной химической науки.</p>	2	–	–	-	[1-5, 9-11]	Проработать лекцию, рек. литературу	лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи
2.	<p>Основные понятия квантовой механики.</p> <p>Математический аппарат квантовой механики. Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения. Вырождение. Матричное представление операторов. Разложение по собственным</p>	2	–	2	1	[1-5, 9-11]	Проработать лекцию, рек. литературу	лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи

	<p>функциям эрмитова оператора. Коммутационные соотношения.</p> <p>Соотношения неопределенностей.</p> <p>Физический смысл и простейшие оценки на их основе.</p>							
3.	<p>Постулаты квантовой механики.</p> <p>Основные постулаты квантовой механики.</p> <p>Квантовые состояния и волновые функции; основные свойства волновых функций.</p> <p>Операторы физических величин (наблюдаемых); средние значения и дисперсии наблюдаемых.</p> <p>Плотность вероятности распределения частиц в пространстве.</p> <p>Операторы координат, импульсов, моментов импульса, кинетической и потенциальной энергии.</p> <p>Оператор Гамильтона (гамильтониан).</p> <p>Эволюция состояний и уравнение Шредингера.</p> <p>Стационарное уравнение Шредингера. Дискретный и непрерывный спектры.</p>	4	–	4	1	[1-5, 9-11]	Проработать лекции, рек. литературу	<p>лабораторные работы,</p> <p>контрольные работы,</p> <p>тестирование,</p> <p>реферат, устный опрос типовые задачи</p>

	Уравнение непрерывности.							
4.	<p>Некоторые примеры решения уравнения Шредингера.</p> <p>Простейшие примеры применения квантовой механики. Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций. Задачи о прямоугольном потенциальном ящике, потенциальном барьере и гармоническом осцилляторе. Теория момента импульса. Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса. Правила сложения моментов импульса. Жесткий ротатор.</p>	4	–	4	1	[1-12]	Проработать лекции, закон, рек. литературу	лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи
5.	<p>Решение уравнения Шредингера для атома водорода (и водородоподобных атомов). Атомные орбитали.</p> <p>Задача об атоме водорода. Разделение переменных. Водородо-подобные орбитали, графическое представление их радиальных и угловых</p>	4	–	6	1	[1-12]	Проработать лекции, рек. литературу	лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи

	частей. Вырождение одноэлектронных состояний как следствие симметрии центрального поля.							
6	Вариационный метод. Приближенные методы решения квантово-механических задач. Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие и при наличии вырождения. Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод. Метод Ритца.	2	–	–	1	[1-5, 9-11]	Проработать лекцию, рек. литературу	лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи
7	Квантовые числа. Молекула в постоянных электрическом и магнитном полях. Дипольный электрический и магнитный моменты системы частиц. Снятие вырождения под влиянием постоянного электрического или магнитного поля (эффекты Штарка и Зеемана.) Спин элементарных частиц и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления.	2	–	–		[1-5, 9-11]	Проработать лекцию, рек. литературу	лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи

8	<p>Многоэлектронные атомы. Свойства многоэлектронных атомов.</p> <p>Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока (самосогласованного поля, ССП). Детерминант Слэтера. Понятие о закрытых и открытых оболочках. Уравнения, определяющие орбитали. Орбитальные энергии и их связь с полной электронной энергией. Теорема Купманса и фотоэлектронные спектры.</p>	2	–	6		[1-5, 9-11]	Проработать лекцию, рек. литературу	лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи
---	--	---	---	---	--	-------------	-------------------------------------	---

	Пределы применимости метода Хартри-Фока. Электронное строение атомов. Электронные конфигурации и термы атомов. Сложение моментов для атомов. Правила Хунда. Электронное строение атомов и периодическая система элементов Д.И. Менделеева.							
9	Теория химической связи. Метод МО ЛКАО. Базисные наборы атомных орбиталей. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа. Минимальные и валентно-расщепленные базисные наборы. Поляризационные и диффузные функции. Метод ССП МО ЛКАО.	2	–	6		[1-5, 9-12]	Прора-ботать лекцию, рек. литературу	лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи
10	Поверхность потенциальной энергии.	2	–	4		[1-6]	Проработать лекцию, рек.	лабораторные работы,

	<p>Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Роль представлений о ППЭ в современной структурной теории химии. Равновесная конфигурация и конформации молекул. Стационарные точки ППЭ, их анализ. Простейшие примеры ППЭ. Двухатомная молекула. Оптимизация геометрических характеристик молекулы. ППЭ и химическая реакция, координата реакции.</p>						литературу	<p>контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи</p>
11	<p>Учет электронной корреляции. Коррелированное движение электронов. Учет энергии электронной корреляции. Понятие о методе конфигурационного взаимодействия. Основные понятия метода теории возмущений, теория Меллера-Плессе. Сравнительная характеристика методов конфигурационного взаимодействия и теории возмущений.</p>	2	–	2		[1-5, 9-11]	<p>Проработать лекцию, рек. литературу</p>	<p>лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи</p>

12	<p>Полуэмпирические методы. Полуэмпирические методы квантовой химии. Методы, использующие нулевое дифференциальное перекрывание. Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии.</p>	2	–	4		[1-5, 9-11]	Проработать лекцию, рек. литературу	лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи
13	<p>Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Учет симметрии ядерной конфигурации при рассмотрении электронной задачи. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Наиболее распространенные программные комплексы (AMPAC, MORAC, GAMESS). Подготовка исходного файла. Ключевые слова как способ управления расчетом. Составление Z-матрицы. Базисные атомы. Определение начального приближения геометрических параметров молекулы. Учет симметрии при задании начального</p>	2	–	6		[1-5, 9-11]	Проработать лекцию, рек. литературу	лабораторные работы, контрольные работы, тестирование, реферат, устный опрос типовые задачи

	приближения. Z-матрица стилия MOPAC и GAUSSIAN. Основные результаты квантовохимических расчетов. Визуализация результатов расчета.							
	Всего часов	32	–	44	5			

Рейтинг – план дисциплины

Б1.О.31 Квантовая химия

направление/специальность 04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия
курс 4, семестр 8

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			Минимальный	Максимальный
Модуль 1				
Текущий контроль				
1. Лабораторные работы	2,50	6	0	15,00
2. Устный опрос	0,50	3	0	1,50
3. Типовые задачи	1,00	5	0	5,00
Рубежный контроль				
1. Тест № 1 (по практике)	10,00	1	0	10,00
Модуль 2				
Текущий контроль				
1. Лабораторные работы	2,50	5	0	12,50
4. Устный опрос	0,50	2	0	1,00
5. Реферат	5,00	1	0	5,00
Рубежный контроль				
1. Тест № 2 (по практике)	10,00	1	0	10,00
2. Контрольная работа	10,00	1	0	10,00
Посещаемость				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6,00
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных) занятий			0	-10,00

			Итого	100
Поощрительные баллы				
Участие в олимпиадах	1,00		0	1,00
Участие в конференциях	2,00		0	2,00
Публикация тезисов	3,00		0	3,00
Публикация статей	4,00		0	4,00
			Итого	10
Итоговый контроль				
Экзамен			0,00	30,00