

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО
решением Ученого совета ННГУ
протокол № 13 от 30.11.2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Квантовая механика и квантовая химия

Уровень высшего образования
Специалитет

Направление подготовки / специальность
04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия

Направленность образовательной программы
Неорганическая химия

Форма обучения
очная

г. Нижний Новгород

2023 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.О.02.04 Квантовая механика и квантовая химия относится к обязательной части образовательной программы.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
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 полужемпирические модели при решении задач химической направленности ОПК-3.2: Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	ОПК-3.1: Знать: основные понятия и математический аппарат квантовой механики и квантовой химии Уметь применять методы квантово-механического описания атомных и молекулярных систем Владеть навыками базовых расчетов атомных и молекулярных свойств на основе квантовохимической и квантовомеханической теории ОПК-3.2: Знать возможности и способы применения программ для расчетов химических систем методом Хюккеля Уметь проводить расчеты сопряженных органических систем методом Хюккеля Владеть методами анализа получаемых результатов, их визуализации	Аудиторная контрольная работа Задачи	Экзамен: Задачи Контрольные вопросы
ОПК-5: Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать	ОПК-5.1: Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля ОПК-5.2: Соблюдает нормы информационной безопасности в	ОПК-5.1: Знать возможности и ограничения современных квантовохимических методов и реализующего их ПО Уметь применять методы квантовохимического расчета, анализировать их результаты на основе	Задачи	Экзамен: Задания Задачи Контрольные вопросы

существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	профессиональной деятельности	сравнения с данными, найденными в интернет Владеть приемами простых квантовомеханических и квантово-химических расчётов и их различных вариантов с применением ПК ОПК-5.2: Знать основные информационные угрозы Уметь применять методы борьбы с вирусами и другими информационными угрозами Владеть приемами безопасного использования ПК		
--	-------------------------------	--	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	5
Часов по учебному плану	180
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	64
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	32
- КСР	2
самостоятельная работа	46
Промежуточная аттестация	36 экзамен

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе			Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/лабораторные работы), часы	Всего	
	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о

Основные понятия и математический аппарат квантовой механики.	18	8	4	12	6
Квантовомеханическое описание простых квантовых систем.	10	4	2	6	4
Теория атома водорода, водородоподобных атомов и ионов.	18	8	4	12	6
Теория углового момента. Спин. Атомные термы.	10	4	2	6	4
Основные приближения в теории многоэлектронных систем.	10	4	2	6	4
Химическая связь и физические эффекты, приводящие к ее образованию.	8	4	2	6	2
Метод Хартри-Фока.	18	8	4	12	6
Молекулярные свойства, определяемые электронной ВФ.	8	4	2	6	2
Поверхность потенциальной энергии. Описание молекулярных свойств и реакционной способности на основе ППЭ.	18	8	4	12	6
Использование симметрии в квантовой химии. Теория групп.	8	4	2	6	2
Современные квантовохимические методы. Базисные наборы.	8	4	2	6	2
Точность квантовохимических методов. Возможности современной квантовой химии.	8	4	2	6	2
Аттестация	36				
КСР	2			2	
Итого	180	64	32	98	46

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Для обеспечения самостоятельной работы обучающихся используются:

- электронный курс "Квантовая механика и квантовая химия" (<https://e-learning.unn.ru/course/view.php?id=3590>).
- открытый онлайн-курс MOOC "-" (-).

Иные учебно-методические материалы: -

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Аудиторная контрольная работа) для оценки сформированности компетенции ОПК-3

- 1 Какова длина волны де Бройля электрона и протона, энергия которых равна средней кинетической энергии поступательного теплового движения молекул при комнатной температуре?
- 2 Длина волны резонансной линии серии Лаймана ($n_2=1$) = 121.5 нм, а длина волны границы серии Бальмера ($n_2=2$) = 365 нм. Найти из этих данных потенциал ионизации атома Н.
- 3 Чему равна частота колебаний, спектроскопическое волновое число (в см^{-1}) энергия нулевых колебаний молекулы HF, если при увеличении длины связи на 0.0 относительно положения равновесия ее энергия увеличивается на 0.2 кДж/моль.
- 4 Колебания протона в карбоксильной группе $-\text{C}(=\text{O})\text{OH}$ характеризуются спектроскопическим волновым числом 3600 см^{-1} . Оценить вероятность туннелирования протона в положение $-\text{C}(\text{OH})=\text{O}$ при $T=10\text{K}$, если активационный барьер такой изомеризации 100 кДж/моль, а расстояние между равновесными

положениями протона 1 Å?

- 5 Найти вероятность нахождения электрона в основном состоянии атома водорода внутри сферы радиуса R . Сколько процентов электронной плотности включает сфера радиусом (1) $a_0/2$, (2) a_0 , (3) $2a_0$?
- 6 Определить электронный терм основного состояния атомов первого и второго периодов.
- 7 В атоме He оба электрона находятся на орбитали. Выразить энергию основного состояния атома He через атомные интегралы, считая, что волновая функция атома имеет вид.
- 8 Методом МОХ найти энергии МО, коэффициенты разложения МО, энергии молекулы, орбитальные заряды атомов и порядки связей в молекулах $\text{CH}_2=\text{C}=\text{O}$ и $\text{CH}_2=\text{C}=\text{NH}$. (Без использования компьютерной программы)
- 9 Методом МОХ найти энергии МО, коэффициенты разложения МО, энергии молекулы, орбитальные заряды атомов и порядки связей в молекулах бутадиена $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ и циклобутадиена C_4H_4 . (Разрешается использовать компьютерную программу диагонализации матриц)
- 10 Определить группу симметрии молекул: H_2O_2 , циклобутан, циклогексан, PCl_5 (тригональная бипирамида), SF_6 , орто-хинон, 1,3,5-триметилбензол, ферроцен, бис-бензолхром, C_{60} .
- 11 Классифицировать МО этилена по неприводимым представлениям группы симметрии молекулы.

Критерии оценивания (оценочное средство - Аудиторная контрольная работа)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки, без ошибок
отлично	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.
очень хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок
хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок
удовлетворительно	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок.
неудовлетворительно	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.

Оценка	Критерии оценивания
плохо	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа

5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Задачи) для оценки сформированности компетенции ОПК-3

Экзаменационные вопросы:

1. Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции в развитии квантовой химии. Современные возможности и применение при решении химических задач.
2. Экспериментальные основы квантовой механики. Квантовые свойства микрочастиц, опыты, демонстрирующие эти свойства.
3. Основные положения квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики. Основные постулаты квантовой механики.
4. Волновая функция, ее физический смысл, основные свойства.
5. Операторы, собственные функции и собственные значения. Представление операторов матрицами.
6. Соотношение неопределенностей. Операторы координат, импульсов, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона.
7. Принцип суперпозиции состояний. Вероятностная трактовка квантовой механики. Полная ортонормированная система волновых функций.
8. Стационарное уравнение Шредингера, его аналогия с уравнениями классической механики. Зависящее от времени уравнение Шредингера.
9. Принцип Паули. Принцип тождественности микрочастиц. Симметричные и антисимметричные волновые функции. Фермионы и бозоны.
10. Решение уравнения Шредингера для задачи о движении свободной частицы и задачи о движении частицы в потенциальном ящике.
11. Гармонический осциллятор. Уравнение Шредингера гармонического осциллятора. Волновые функции и спектр энергий, их особенности.
12. Квантово-механическая задача о жестком ротаторе. Волновая функция и энергия жесткого ротатора. Сферические гармоники, угловая зависимость волновых функций.
13. Атом водорода, вид волновой функции. Физический смысл квантовых чисел. Зависимость радиальной составляющей волновой функции от расстояния между ядром и электроном при различных квантовых числах. Атомная система единиц.
14. Угловые моменты в многоэлектронных атомах (орбитальный, спиновый, полный). Атомные термы в нулевом и первом приближении схемы Рассела-Саундерса. Правила Гунда. Приближение jj -связи.
15. Многоэлектронные системы. Одноэлектронное приближение. Приближение самосогласованного поля (ССП). Вариационный принцип.
16. Математическая формулировка одноэлектронного приближения. Метод СП Хартри-Фока. Ограниченный и неограниченный метод СП

- ХФР. Операторы Фока, кулоновский, обменный, их собственные значения.
17. Молекулярное уравнение Шредингера. Приближение Борна-Оппенгеймера и адиабатическое приближение. Понятие о вибронных взаимодействиях. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана. Теорема Купманса.
 18. Физические эффекты, приводящие к образованию химической связи. Делокализация электронной плотности. Образование ковалентной связи. Образование ионной связи.
 19. Гомоядерные двухатомные молекулы, вычисление энергии их МО методом МО ССП. Секулярное уравнение. Связывающие и разрыхляющие орбитали.
 20. Молекулярные термы. Концепции гибридизации и резонанса в терминах квантовой механики. Качественная теория МО. Корреляционные орбитальные диаграммы.
 21. Оценка электронных свойств молекулы. Потенциалы ионизации. Мультипольные моменты. Заряды атомов. Различные шкалы атомных зарядов. Оценка порядков связи и валентности атомов. Понятие об индексах реакционной способности.
 22. Концепция ППЭ. Оценка физико-химических свойств вещества и реакционной способности на основе изучения ППЭ. Стационарные точки, локальные минимумы и переходные состояния.
 23. Оптимизация геометрии, поиск переходных состояний. Определение термодинамических параметров реакций и констант скорости на основе исследования ППЭ.
 24. Симметрия молекулярных систем. Основные понятия теории групп. Группы симметрии молекул.
 25. Неприводимые представления. Характеры НП. Использование теории групп в квантовой химии. Классификация МО и молекулярных термов. Сокращение размерности гамильтониана. Оценка молекулярных интегралов.
 26. Неэмпирические (*ab initio*) методы в квантовой химии. Преимущества и недостатки неэмпирических методов. Электронная корреляция.
 27. Методы учета электронной корреляции. Методы конфигурационного взаимодействия. Теория возмущений. Теория связанных кластеров. Их сравнительная характеристика, области применения.
 28. Теория функционала плотности. Ее теоретические основы, область применения, возможности и ограничения.
 29. Полуэмпирические методы. Приближения валентных электронов, нулевого дифференциального перекрытия, расчет одно- и двухэлектронных интегралов. Приближение нулевого двухатомного дифференциального перекрытия. Методы MNDO, AM1 и PM3.
 30. Проблема выбора базиса АО. Основные базисные наборы АО: минимальный, двух- и трехэкспоненциальные, корреляционно-согласованные. Поляризационные функции. Диффузные функции. Их особенности и применение для описания различных химических систем.

экзаменационные задачи:

- 1 Какова длина волны де Бройля электрона и протона, энергия которых равна средней кинетической энергии поступательного теплового движения молекул при комнатной температуре?
- 2 Длина волны резонансной линии серии Лаймана ($n_2=1$) = 121.5 нм, а длина волны границы серии Бальмера ($n_2=2$) = 365 нм. Найти из этих данных потенциал ионизации атома H.
- 3 Чему равна частота колебаний, спектроскопическое волновое число (в см^{-1}) и энергия нулевых колебаний молекулы HF, если при увеличении длины связи на 0.01 Å относительно положения равновесия ее энергия увеличивается на 0.2 кДж/моль.
- 4 Колебания протона в карбоксильной группе $-\text{C}(=\text{O})\text{OH}$ характеризуются спектроскопическим волновым числом 3600 см^{-1} . Оценить вероятность туннелирования протона в положение $-\text{C}(\text{OH})=\text{O}$ при $T=10\text{K}$, если активационный барьер такой изомеризации 100 кДж/моль, а расстояние между равновесными положениями протона 1 Å?
- 5 Найти вероятность нахождения электрона в основном состоянии атома водорода внутри сферы радиуса R . Сколько процентов электронной плотности включает сфера радиусом (1) $a_0/2$, (2) a_0 , (3) $2a_0$?
- 6 Определить электронный терм основного состояния атомов первого и второго периодов.
- 7 В атоме He оба электрона находятся на орбитали. Выразить энергию основного состояния атома He через атомные интегралы, считая, что волновая функция атома имеет вид.
- 8 Методом МОХ найти энергии МО, коэффициенты разложения МО, энергии молекулы, орбитальные заряды атомов и порядки связей в молекулах $\text{CH}_2=\text{C}=\text{O}$ и $\text{CH}_2=\text{C}=\text{NH}$. (Без использования компьютерной программы)
- 9 Методом МОХ найти энергии МО, коэффициенты разложения МО, энергии молекулы, орбитальные заряды атомов и порядки связей в молекулах бутадиена $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ и циклобутадиена $\text{c}-(\text{CH}=\text{CH})_2$. (Разрешается использовать компьютерную программу диагонализации матриц)
- 10 Определить группу симметрии молекул: H_2O_2 , циклобутан, циклогексан, PCl_5 (тригональная бипирамида), SF_6 , орто-хинон, 1,3,5-триметилбензол, ферроцен, бис-бензолхром, C_6O .
- 11 Классифицировать МО этилена по неприводимым представлениям группы симметрии молекулы.

5.1.3 Типовые задания (оценочное средство - Задачи) для оценки сформированности компетенции ОПК-5

1. Метод Хюккеля. Программное обеспечение для расчетов методом Хюккеля.	ОПК-5
2. Современные квантовохимические методы для оценки физико-химических свойств и реакционной способности.	

Критерии оценивания (оценочное средство - Задачи)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Продемонстрирован уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки, без ошибок
отлично	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.
очень хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок
хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок
удовлетворительно	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибки.
неудовлетворительно	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.
плохо	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
		не зачтено		зачтено			
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несуществе	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.

	ответа			ошибок	нных ошибок		
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными и несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторым и недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторым и недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации

5.3.1 Типовые задания, выносимые на промежуточную аттестацию:

Оценочное средство - Задачи

Экзамен

Критерии оценивания (Задачи - Экзамен)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки. Без ошибок
отлично	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.
очень хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок
хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок
удовлетворительно	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибки.
неудовлетворительно	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.
плохо	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа

Типовые задания (Задачи - Экзамен) для оценки сформированности 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)

экзаменационные задачи:

- 1 Какова длина волны де Бройля электрона и протона, энергия которых равна средней кинетической энергии поступательного теплового движения молекул при комнатной температуре?
- 2 Длина волны резонансной линии серии Лаймана ($n_2=1$) = 121.5 нм, а длина волны границы серии Бальмера ($n_2=2$) = 365 нм. Найти из этих данных потенциал ионизации атома Н.
- 3 Чему равна частота колебаний, спектроскопическое волновое число (в см^{-1}) энергия нулевых колебаний молекулы HF, если при увеличении длины связи на 0.0 относительно положения равновесия ее энергия увеличивается на 0.2 кДж/моль.

- 4 Колебания протона в карбоксильной группе $-\text{C}(=\text{O})\text{OH}$ характеризуются спектроскопическим волновым числом 3600 см^{-1} . Оценить вероятность туннелирования протона в положение $-\text{C}(\text{OH})=\text{O}$ при $T=10\text{K}$, если активационный барьер такой изомеризации 100 кДж/моль , а расстояние между равновесными положениями протона 1 \AA ?
- 5 Найти вероятность нахождения электрона в основном состоянии атома водорода внутри сферы радиуса R . Сколько процентов электронной плотности включает сфера радиусом (1) $a_0/2$, (2) a_0 , (3) $2a_0$?
- 6 Определить электронный терм основного состояния атомов первого и второго периодов.
- 7 В атоме He оба электрона находятся на орбитали. Выразить энергию основного состояния атома He через атомные интегралы, считая, что волновая функция атома имеет вид.
- 8 Методом МОХ найти энергии МО, коэффициенты разложения МО, энергии молекулы, орбитальные заряды атомов и порядки связей в молекулах $\text{CH}_2=\text{C}=\text{O}$ и $\text{CH}_2=\text{C}=\text{NH}$. (Без использования компьютерной программы)
- 9 Методом МОХ найти энергии МО, коэффициенты разложения МО, энергии молекулы, орбитальные заряды атомов и порядки связей в молекулах бутадиена $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ и циклобутадиена $\text{c}-(\text{CH}=\text{CH})_2$. (Разрешается использовать компьютерную программу диагонализации матриц)
- 10 Определить группу симметрии молекул: H_2O_2 , циклобутан, циклогексан, PCl_5 (тригональная бипирамида), SF_6 , орто-хинон, 1,3,5-триметилбензол, ферроцен, бис-бензолхром, C_6O .
- 11 Классифицировать МО этилена по неприводимым представлениям группы симметрии молекулы.

Типовые задания (Задачи - Экзамен) для оценки сформированности компетенции ОПК-5

(Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности)

экзаменационные задачи:

- 1 Какова длина волны де Бройля электрона и протона, энергия которых равна средней кинетической энергии поступательного теплового движения молекул при комнатной температуре?
- 2 Длина волны резонансной линии серии Лаймана ($n_2=1$) = 121.5 нм , а длина волны границы серии Бальмера ($n_2=2$) = 365 нм . Найти из этих данных потенциал ионизации атома H.
- 3 Чему равна частота колебаний, спектроскопическое волновое число (в см^{-1}) и энергия нулевых колебаний молекулы HF, если при увеличении длины связи на 0.0

относительно положения равновесия ее энергия увеличивается на 0.2 кДж/моль.

- 4 Колебания протона в карбоксильной группе $-\text{C}(=\text{O})\text{OH}$ характеризуются спектроскопическим волновым числом 3600 см^{-1} . Оценить вероятность туннелирования протона в положение $-\text{C}(\text{OH})=\text{O}$ при $T=10\text{K}$, если активационный барьер такой изомеризации 100 кДж/моль , а расстояние между равновесными положениями протона 1 \AA ?
- 5 Найти вероятность нахождения электрона в основном состоянии атома водорода внутри сферы радиуса R . Сколько процентов электронной плотности включает сфера радиусом (1) $a_0/2$, (2) a_0 , (3) $2a_0$?
- 6 Определить электронный терм основного состояния атомов первого и второго периодов.
- 7 В атоме He оба электрона находятся на орбитали. Выразить энергию основного состояния атома He через атомные интегралы, считая, что волновая функция атома имеет вид.
- 8 Методом МОХ найти энергии МО, коэффициенты разложения МО, энергии молекулы, орбитальные заряды атомов и порядки связей в молекулах $\text{CH}_2=\text{C}=\text{O}$ и $\text{CH}_2=\text{C}=\text{NH}$. (Без использования компьютерной программы)
- 9 Методом МОХ найти энергии МО, коэффициенты разложения МО, энергии молекулы, орбитальные заряды атомов и порядки связей в молекулах бутадиена $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ и циклобутадиена $\text{c}-(\text{CH}=\text{CH})_2$. (Разрешается использовать компьютерную программу диагонализации матриц)
- 10 Определить группу симметрии молекул: H_2O_2 , циклобутан, циклогексан, PCl_5 (тригональная бипирамида), SF_6 , орто-хинон, 1,3,5-триметилбензол, ферроцен, бис-бензолхром, C_{60} .
- 11 Классифицировать МО этилена по неприводимым представлениям группы симметрии молекулы.

Оценочное средство - Контрольные вопросы

Экзамен

Критерии оценивания (Контрольные вопросы - Экзамен)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки. Без ошибок.
отлично	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.
очень хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.

Оценка	Критерии оценивания
хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок
удовлетворительно	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибки.
неудовлетворительно	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.
плохо	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа

Типовые задания (Контрольные вопросы - Экзамен) для оценки сформированности 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)

Экзаменационные вопросы:

1. Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции в развитии квантовой химии. Современные возможности и применение при решении химических задач.
2. Экспериментальные основы квантовой механики. Квантовые свойства микрочастиц, опыты, демонстрирующие эти свойства.
3. Основные положения квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики. Основные постулаты квантовой механики.
4. Волновая функция, ее физический смысл, основные свойства.
5. Операторы, собственные функции и собственные значения. Представление операторов матрицами.
6. Соотношение неопределенностей. Операторы координат, импульсов, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона.
7. Принцип суперпозиции состояний. Вероятностная трактовка квантовой механики. Полная ортонормированная система волновых функций.
8. Стационарное уравнение Шредингера, его аналогия с уравнениями классической механики. Зависящее от времени уравнение Шредингера.
9. Принцип Паули. Принцип тождественности микрочастиц. Симметричные и антисимметричные волновые функции. Фермионы и бозоны.
10. Решение уравнения Шредингера для задачи о движении свободной частицы и задачи о движении частицы в потенциальном ящике.
11. Гармонический осциллятор. Уравнение Шредингера гармонического осциллятора. Волновые функции и спектр энергий, их особенности.
12. Квантово-механическая задача о жестком ротаторе. Волновая функция и энергия жесткого ротатора. Сферические гармоники, угловая зависимость волновых функций.
13. Атом водорода, вид волновой функции. Физический смысл квантовых

чисел. Зависимость радиальной составляющей волновой функции от расстояния между ядром и электроном при различных квантовых числах. Атомная система единиц.

14. Угловые моменты в многоэлектронных атомах (орбитальный, спиновый, полный). Атомные термы в нулевом и первом приближении схемы Рассела-Саундерса. Правила Гунда. Приближение jj -связи.
15. Многоэлектронные системы. Одноэлектронное приближение. Приближение самосогласованного поля (ССП). Вариационный принцип.
16. Математическая формулировка одноэлектронного приближения. Метод СПП Хартри-Фока. Ограниченный и неограниченный метод СПП ХФР. Операторы Фока, кулоновский, обменный, их собственные значения.
17. Молекулярное уравнение Шредингера. Приближение Борна-Оппенгеймера и адиабатическое приближение. Понятие о вибронных взаимодействиях. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана. Теорема Купманса.
18. Физические эффекты, приводящие к образованию химической связи. Делокализация электронной плотности. Образование ковалентной связи. Образование ионной связи.
19. Гомоядерные двухатомные молекулы, вычисление энергии их МО методом МО СПП. Секулярное уравнение. Связывающие и разрыхляющие орбитали.
20. Молекулярные термы. Концепции гибридизации и резонанса в терминах квантовой механики. Качественная теория МО. Корреляционные орбитальные диаграммы.
21. Оценка электронных свойств молекулы. Потенциалы ионизации. Мультипольные моменты. Заряды атомов. Различные шкалы атомных зарядов. Оценка порядков связи и валентности атомов. Понятие об индексах реакционной способности.
22. Концепция ППЭ. Оценка физико-химических свойств вещества и реакционной способности на основе изучения ППЭ. Стационарные точки, локальные минимумы и переходные состояния.
23. Оптимизация геометрии, поиск переходных состояний. Определение термодинамических параметров реакций и констант скорости на основе исследования ППЭ.
24. Симметрия молекулярных систем. Основные понятия теории групп. Группы симметрии молекул.
25. Неприводимые представления. Характеры НП. Использование теории групп в квантовой химии. Классификация МО и молекулярных термов. Сокращение размерности гамильтониана. Оценка молекулярных интегралов.
26. Неэмпирические (*ab initio*) методы в квантовой химии. Преимущества и недостатки неэмпирических методов. Электронная корреляция.
27. Методы учета электронной корреляции. Методы конфигурационного взаимодействия. Теория возмущений. Теория связанных кластеров. Их сравнительная характеристика, области применения.

28. Теория функционала плотности. Ее теоретические основы, область применения, возможности и ограничения.
29. Полуэмпирические методы. Приближения валентных электронов, нулевого дифференциального перекрытия, расчет одно- и двухэлектронных интегралов. Приближение нулевого двухатомного дифференциального перекрытия. Методы MNDO, AM1 и PM3.
30. Проблема выбора базиса АО. Основные базисные наборы АО: минимальный, двух- и трехэкспоненциальные, корреляционно-согласованные. Поляризационные функции. Диффузные функции. Их особенности и применение для описания различных химических систем.

Типовые задания (Контрольные вопросы - Экзамен) для оценки сформированности компетенции ОПК-5 (Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности)

1. Квантовые свойства микрочастиц, опыты, демонстрирующие эти свойства.
2. Основные постулаты квантовой механики.
3. Волновая функция, ее физический смысл, основные свойства.
4. Общий вид стационарного уравнения Шредингера. Общий вид времязависимого уравнения Шредингера.
5. Гармонический осциллятор. Уравнение Шредингера гармонического осциллятора. Волновые функции и спектр энергий.
6. Атом водорода, вид волновой функции. Физический смысл квантовых чисел.
7. Молекулярное уравнение Шредингера. Приближение Борна-Оппенгеймера и адиабатическое приближение.
8. Физические эффекты, приводящие к образованию химической связи.
9. Основные положения и физический смысл метода Хартри-Фока и Хартри-Фока-Рутана. Метод молекулярных орбиталей.
10. Определение поверхности потенциальной энергии (ППЭ). Оценка физико-химических свойств вещества и реакционной способности на основе изучения ППЭ.

1. Метод Хюккеля. Программное обеспечение для расчетов методом Хюккеля.
2. Современные квантовохимические методы для оценки физико-химических свойств и реакционной способности.

Оценочное средство - Задания

Экзамен

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Крашенинин В. И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам / Крашенинин В. И., Газенаур Е. Г., Кузьмина Л. В. - Кемерово : КемГУ, 2012. - 56 с. - Библиогр.: доступна в карточке книги, на сайте ЭБС Лань. - Книга из коллекции КемГУ - Химия. - ISBN 978-5-8353-1298-6., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=694512&idb=0>.
2. Майер И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул : учебное пособие / Майер И. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 387 с. - ISBN 978-5-93208-516-5., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=838091&idb=0>.
3. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие / Цирельсон В.Г. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 522 с. - ISBN 978-5-93208-518-9., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=838103&idb=0>.

Дополнительная литература:

1. Хигаси К. Квантовая органическая химия / пер. с англ. М. Н. Варгафтика ; под ред. М. Е. Дяткиной. - М. : Мир, 1967. - 379 с. : черт. - 1.55., 4 экз.
2. Хедвиг П. Прикладная квантовая химия / пер. с англ. М. А. Бродского и Э. Д. Германа ; под ред. А. М. Бродского. - М. : Мир, 1977. - 595 с. : ил. - 3.80., 1 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

1. Игнатов С.К. Квантовая химия. Ч.1. <http://www.unn.ru/chem/ignatov/ignatovSK-KvantovayaKhimiya-1.pdf>
2. Игнатов С.К. Квантовая химия. Ч.2. <http://www.unn.ru/chem/ignatov/ignatovSK-KvantovayaKhimiya-2.pdf>
3. Игнатов С.К. Задачи по квантовой химии. <http://www.unn.ru/chem/ignatov/ignatovSK-ZadachiQC.pdf>
4. Программа для решения задач методом Хюккеля. <http://www.unn.ru/chem/ignatov/Huckel.xls>.
5. <https://www.coursera.org/browse/computer-science>

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ по специальности 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия.

Автор(ы): Игнатов Станислав Константинович, доктор химических наук, профессор.

Заведующий кафедрой: Маркин Алексей Владимирович, доктор химических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 10.11.2022 г., протокол № 2.