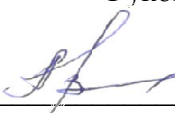
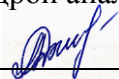


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
АСТРАХАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОПОП


____ А.В. Великородов
«31» мая 2021 г.

УТВЕРЖДЕНО

Заведующий кафедрой аналитической и
физической химии  Л.А. Джигола
«3» июня 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Составитель

**Золотарева Н.В., к.т.н., доцент,
доцент кафедры АФХ**

Направление подготовки / специальность

04.03.01 ХИМИЯ

Направленность (профиль) ОПОП

Медицинская и фармацевтическая химия

Квалификация (степень)

бакалавр

Форма обучения

очно-заочная

Год приема

2020

Курс

2

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Целями освоения дисциплины “Квантовая механика и квантовая химия” является знакомство студентов с основными теоретическими положениями квантовой механики и квантовой химии, изучение начала квантовой механики и с ее основными приложениями к конкретным химическим системам. Анализ решений базовых квантово-механических задач, рассмотрение модельных систем в теории химической связи, межмолекулярных взаимодействий позволяют студенту с физической точки зрения понять природу образования соединений, спрогнозировать поведение тех или иных молекул под действием различных факторов.

1.2. Задачи освоения дисциплины “Квантовая механика и квантовая химия”: знакомство студентов с ключевыми понятиями и постулатами в квантовой механике, существующими методами решения базового стационарного уравнения Шредингера для одно- и многоэлектронных систем, схемами, алгоритмами вычисления структурных и спектроскопических характеристик, методами предсказания реакционной способности молекул, вычислительными квантово-химическими программами.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина “Квантовая механика и квантовая химия” входит в вариативную часть (Б1.Б.16) обязательных дисциплин. Данная дисциплина логически встраивается в структуру ОПОП как с точки зрения преемственности содержания, так и с точки зрения непрерывности процесса формирования компетенций выпускника.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы следующие знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами:

- «Высшая математика»

Знания: основные элементы аналитической геометрии и математического анализа;

Умения: вычислять координаты точек на плоскости; решать системы линейных алгебраических уравнений;

Навыки: осуществлять интегрирование и дифференцирование функций; решения дифференциальных уравнений.

- «Физика»

Знания: основные физические свойства света, волны; законов квантовой и классической механики;

Умения: решать фундаментальные задачи на движение частицы;

Навыки: обработки данных, формирования выводов и постановка экспериментов.

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- неорганическая химия;

- органическая химия;

- строение вещества;

- физическая химия.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки (специальности):

б) общепрофессиональных (ОПК):

«ОПК-4» - Способность планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач.

Таблица 1
Декомпозиция результатов обучения

Код компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
<i>ОПК-4</i>	теоретические основы квантовой механики для решения задач в органической, биоорганической и физической химии, связанных с моделированием процессов и изучением свойств веществ.	использовать математический аппарат, алгоритмы расчетов квантовой механики для моделирования процессов и изучения свойств веществ.	приемами квантовой механики, методами, алгоритмами математического анализа при моделировании схем межмолекулярных взаимодействий и интерпретации результатов расчета.

Код компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
<i>ОПК-4</i>	<i>ИОПК-4.1.1</i> Использует базовые знания в теории квантовой механики при описании поведения атомов в молекуле и прогнозе реакционной способности. <i>ИОПК-4.1.2</i> методы, алгоритмы постановки вычислительного эксперимента, а также способы обработки результатов.	<i>ИОПК-4.2.1</i> использовать терминологию и основные понятия направлений. <i>ИОПК-4.2.2</i> анализировать результаты экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.	<i>ИОПК-4.3.1</i> Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений <i>ИОПК-4.3.2</i> способами систематизации и анализа результатов наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет 6 зачетных единиц, в том числе 36 часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий в соответствии с учебным планом 18 часов – лекции, 18 часов – лабораторных занятий, 180 часа – на самостоятельную работу, экзамен – 3 семестр.

Таблица 2

Структура и содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела, темы	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа (в часах)			Самостоятельная работа (в часах)		Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
1	Основы математического аппарата квантовой механики.	3	1-4	4		4		36	Блок №1 (решение задач для самоконтроля) Десятиминутка «Вопрос-Ответ» Контрольная работа №1
2	Простейшие примеры решения уравнения Шредингера. Модельные задачи квантовой механики.	3	5-8	4		4		36	Блок №2 (решение задач для самоконтроля) Контрольная работы №2
3	Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.	4	9-12	4		4		36	Работа в минигруппах на ПК
4	Полуэмпирически е методы изучения электронного строения атомов и молекул.	3	13-17	3		3		36	Работа в минигруппах на ПК Тестирование
5	Методы учета электронной корреляции.	3	18-20	3		3		36	Работа в минигруппах на ПК
ИТОГО				18		18		180	ЭКЗАМЕН

Условные обозначения:

Л – занятия лекционного типа; ПЗ – практические занятия, ЛР – лабораторные работы; КР – курсовая работа; СР – самостоятельная работа по отдельным темам.

Таблица 3

Матрица соотнесения разделов, тем учебной дисциплины
и формируемых в них компетенций

Разделы, темы дисциплины	Кол-во часов	Компетенции	
		ОПК-4	общее количество компетенций
Основы математического аппарата квантовой механики.	44	+	1
Простейшие примеры решения уравнения	44	+	1

Шредингера. Модельные задачи квантовой механики.			
Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.	44	+	1
Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.	42	+	1
Методы учета электронной корреляции.	42	+	1
Итого	216		

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Раздел 1. Основы математического аппарата квантовой механики.

Тема 1.1. Введение в систему операторов. Понятия о функциях и операторах, характеристика и основные определения. Сумма, разность, произведение операторов, коммутация операторов. Эрмитовы операторы. Операторные уравнения, собственные значения и собственные функции оператора. Вырождение. Свойства собственных значений и собственных функций линейных эрмитовых операторов: вещественность собственных значений, ортогональность и полнота системы собственных функций, нормировка собственных функций и их ортогонализация для вырожденных собственных значений, условие ортонормированности собственных функций. Матричное представление операторов. Коммутационные соотношения.

Тема 1.2. Обоснование физического смысла постулатов квантовой механики. Введение в постулаты квантовой механики. Физическое содержание описания состояния системы через волновую функцию. Среднее значение физической величины в серии испытаний. Соотношение неопределенностей Гейзенберга. Простейшие операторы квантовой механики. Построение оператора Гамильтона $\hat{H}$. Операторы кинетической ($\hat{T}$) и потенциальной ($\hat{U}$) энергий.

Тема 1.3. Простейшие примеры применения квантовой механики. Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций. Одномерная модель свободной частицы. Движение частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Одномерный потенциальный барьер. Движение частицы в прямоугольной трубке. Движение частицы по окружности. Линейный гармонический осциллятор. Общая задача об атоме водорода, атоме гелия. Разделение переменных.

Раздел 2. Простейшие примеры решения уравнения Шредингера.

Модельные задачи квантовой химии.

Тема 2.1. Решение стационарного уравнения Шредингера. Волновое уравнение Шредингера. Условие стационарности состояния. Стационарное уравнение Шредингера как частный случай операторного уравнения. Свойства стационарных состояний. Постановка задачи, вид оператора Гамильтона и интегрирование уравнения Шредингера. Нормировка волновых функций. Дискретность энергетического спектра частицы и его анализ. Волновые функции и распределение вероятностей для различных энергетических состояний частицы. Водородоподобный атом – постановка задачи, вид стационарного уравнения Шредингера в сферической системе координат. Угловая (сферические функции $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$) и радиальная ($R_{n,l}(r)$) части волновой функции. Главное квантовое число (n) и его взаимосвязь с другими квантовыми числами. Дискретность энергетического спектра водородоподобного атома. Расчет радиальных функций. Взаимосвязь между квантовыми числами и степень вырождения энергетических уровней водородоподобного атома. Вероятностная трактовка волновой функции и понятие атомной орбитали и спин-орбитали. Физическое содержание понятия электронная плотность. Явный вид выражений, определяющих радиальное $dW_{n,l}(r)$ и угловое $dW_{l,m}(\theta, \varphi)$ распределения электронной плотности. Радиальное распределение электронной плотности – физическое

содержание и анализ распределений для конкретных электронных состояний. Размер атомной орбитали. Общие закономерности радиального распределения электронной плотности в зависимости от значений квантовых чисел n и l . Задачи о наиболее вероятном и среднем расстояниях между ядром и электроном. Угловое распределение электронной плотности. Направления максимумов электронной плотности и узловые поверхности. Формы s -, p -, d -электронных орбиталей. Методика построения контурных диаграмм полного распределения электронной плотности, области наиболее вероятного пребывания электрона для разных состояний.

Тема 2.2. Электронное состояние водородоподобного атома. Анализ энергетического спектра водородоподобного атома. Спин-орбитальное взаимодействие – физическое содержание явления. Теорема сложения моментов, полный момент импульса электрона, квантовые числа полного момента j и m_j . Одноэлектронное приближение. Реализация принципа Паули при записи полной волновой функции многоэлектронного атома в виде определителя Слейтера для одноэлектронных спин-орбиталей. Спиновая корреляция в движении электронов. Уравнения Хартри-Фока и методика их решения методом ССП. Пробные функции Слетера-Зенера и Гаусса. Теорема Купманса. Состояние электрона в атоме и квантовые числа. Связь квантовых чисел с основными элементами электронного строения атома: квантовое состояние, атомная орбиталь, электронная оболочка, электронный слой.

Тема 2.3. Приближенные методы квантовой механики для стационарных состояний. Оператор Гамильтона и волновая функция для молекулярных систем. Адиабатическое приближение в теории химической связи. Поверхность потенциальной энергии молекулярной системы, равновесная ядерная конфигурация и ее характеристики – длины химических связей и валентные углы. Вариационный принцип квантовой механики. Вариационный принцип Ритца – пробная функция как линейная комбинация известных функций с коэффициентами в качестве вариационных параметров. Реализация метода Ритца.

Тема 2.4. Квантово-механические аспекты в химических задачах. Результаты расчета молекулы водорода по методу Гайтлера и Лондона, анализ ее энергетических состояний и волновых функций. Кулоновский, обменный интегралы молекулы и интеграл перекрывания АО и их зависимость от межъядерного расстояния. Потенциальные кривые взаимодействия двух атомов водорода. Длина химической связи и ее энергия. Распределение электронной плотности в молекуле, перекрывание АО как необходимый элемент образования химической связи. Спиновая составляющая волновой функции, спаривание электронов при образовании химической связи как требование принципа Паули. Теория Гайтлера-Лондона как основа метода валентных связей. Классификация химических связей по механизму их образования (обменный и донорно-акцепторный) и по способу перекрывания валентных атомных орбиталей (σ , π , δ – связи). Полярность связи и дипольный момент двухатомной молекулы. Связь между пространственным строением многоатомной молекулы и ее дипольным моментом. Метод молекулярных орбиталей – основные положения и постановка задачи. Одноэлектронное приближение, понятие молекулярной орбитали. Приближение МО ЛКАО в методе Хартри-Фока, уравнения Рутана и методика их решения. Электронная конфигурация молекулы и правила ее составления. Молекула водорода в методе МО – построение волновой функции в виде ЛКАО и расчет энергетических состояний молекулы. Анализ распределения электронной плотности в молекуле водорода. Связывающая и разрыхляющая МО и их формы. Энергетическая диаграмма молекулы и ее электронная конфигурация.

Раздел 3. Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.

Понятие о базисных функциях для неэмпирических расчетов. Аналитические базисные функции. Слейтеровские атомные орбитали. Двухэкспонентные слейтеровские

орбитали. Гауссовские орбитали. Атомные базисные наборы, характеристика. Молекулярные базисные наборы Попла. Другие базисные наборы. Многоуровневые экстраполяционные расчетные схемы. Точность неэмпирических квантово-химических расчетов молекул.

Раздел 4. Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.

Общая характеристика полуэмпирических методов расчета молекул в рамках метода ССП МО ЛКАО. Основные требования к полуэмпирическим методам. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием. Параметризация полуэмпирических методов. Методы, использующие частичное пренебрежение дифференциальным перекрыванием. Разделение σ - и π -электронов. π -Электронное приближение. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Полуэмпирические уравнения Хюккеля как следствие неэмпирических уравнений Рутана. Определение качественных характеристик сопряженных и ароматических углеводородов – вида МО ЛКАО и формы МО, энергетических диаграмм, зарядов на атомах, порядков связи, индексов свободной валентности, суперделокализуемости, поляризуемости, энергии разрыва химической связи, энергии делокализации электронной плотности, энергии электронного перехода. Оценка эмпирических параметров уравнений МО Хюккеля по термохимическим и спектроскопическим данным. Составление молекулярных диаграмм органических (альтернантные и неальтернантные углеводороды).

Раздел 5. Методы учета электронной корреляции.

Общая характеристика эффектов, связанных с электронной корреляцией. Метод конфигурационного взаимодействия. Многоконфигурационные методы ССП. Метод связанных кластеров. Метод многочастичной теории возмущений. Метод валентных схем. Сравнительный анализ методов, учитывающих корреляционные эффекты. Метод функционала плотности. Общая характеристика. Химические концепции в теории функционала плотности.

5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

5.1. Указания по организации и проведению лекционных, практических (семинарских) и лабораторных занятий с перечнем учебно-методического обеспечения

Студентам отводится время на самостоятельную работу в объеме 18 часов, которая включает изучение материалов лекционного курса, ознакомление с материалами, изложенными в учебниках и иных источниках информации, включая поисковую работу в интернете, выполнение домашних (задач для самоконтроля) и тестовых заданий. Полезно использовать образовательный портал цифрового обучения Астраханского государственного университета (<http://moodle.asu.edu.ru/>) на котором периодически обновляется информация о текущих заданиях и присутствует необходимый материал по курсу учебной дисциплины и/или использовать для этих целей общий электронный адрес группы.

Предусмотрено самостоятельное выполнение заданий в виде блоков по отдельным темам дисциплины:

Блок №1 включает темы 1.1 «Введение в систему операторов», 1.2 «Обоснование физического смысла постулатов квантовой механики» раздела 1 «Основы математического аппарата квантовой механики»;

Блок №2 включает темы 1.3. «Простейшие примеры применения квантовой механики» раздела 1 «Основы математического аппарата квантовой механики», темы 2.1. «Решение стационарного уравнения Шредингера», 2.2. «Электронное состояние водородоподобного атома», 2.3. «Приближенные методы квантовой механики для стационарных состояний», 2.4. «Квантово-механические аспекты в химических задачах» раздел 2 «Простейшие примеры решения уравнения Шредингера».

Пакет заданий выдается в начале изучения соответствующих тем. Задания выполняются в отдельной тетради. На самостоятельное оформление блока отводится две недели. Оформленная тетрадка сдается преподавателю на проверку перед текущей контрольной работой. После изучения некоторых разделов практической части курса проводятся контрольные аудиторские работы. Для успешного написания работы необходима системная подготовка по опорным конспектам и рекомендованной литературе. Обычно, контрольная работа имеет 5-8 вариантов, каждый вариант содержит 3, 4 проблемных задания.

Лекция в классическом представлении является главным звеном дидактического цикла обучения, однако такие лекции дополнены презентациями, видеороликами, «ошибками» и др.

Лекционный материал выстроен следующим образом:

- изложение материала ведется от простого к сложному, от известного к неизвестному с включением интерактивных методов;
- выстраивается логичность, четкость и ясность изложения материала с примерами выполнения заданий;
- смысловая часть должна содержать факты, закономерности и статистические данные;
- с целью активизации деятельности студентов часть лекционного материала включает проблемные темы с дискуссией (диалогом);
- прослеживается тесная связь теоретических положений, формулировок и выводов с практикой и реализацией будущей профессиональной деятельностью студентов.

Работа в минигруппах на персональных компьютерах предусматривает выполнение заданий вычислительного практикума по отдельным темам разделов: «Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул», «Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул», «Методы учета электронной корреляции». Состав минигруппы 2-4 человека. Форма отчета (см. в примере оформления отчета) включает основные пункты: описание метода выполнения расчета и базисного набора; таблицу вычисленных данных по структуре соединений и/или протекающего процесса (структурные; энергетические и силовые параметры) и экспериментальных (справочных) данных; сформированы выводы о реакционной способности соединения в различных условиях.

Тестирование направлено на проверку готовности студентов к экзамену и включает ключевые вопросы всех разделов дисциплины.

Перечень учебно-методического обеспечения для выполнения самостоятельной работы по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия»:

1. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студентов вузов ... по химическим специальностям. – М.: Академия, 2008. - 384 с. - (Высшее профессиональное образование) (31 экз);
2. Золотарева Н.В. Основы квантовой механики в вопросах и задачах. Модельные примеры квантовой химии: Учебно-методическое пособие. – Астрахань: Издатель: Сорокин Роман Васильевич, 2020. – 58 с. (8 экз. + Электронный вариант)
3. Соловьев М.Е. Компьютерная химия – М.: СОЛОН-Пресс, 2005. - 536 с. - (Библиотека студента) (4 экз);
4. Цирельсон В.Г., Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 3-е изд., испр.

- (эл.). - М.: БИНОМ, 2017. - 522 с. (Учебник для высшей школы) - ISBN 978-5-00101-502-4 Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015024.html>
5. Громова Е.Ю., Строение атома. Химическая связь [Электронный ресурс]: учебное пособие / Громова Е. Ю. - Казань: Издательство КНИТУ, 2017. - 108 с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788222769.html>

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 4

Содержание самостоятельной работы обучающихся

Номер раздела (темы)	Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
Основы математического аппарата квантовой механики.	Свойства собственных значений и собственных функций линейных эрмитовых операторов. Матричное представление операторов. Коммутационные соотношения. Простейшие операторы квантовой механики: гамильтон $\hat{H}$, операторы кинетической ($\hat{T}$) и потенциальной ($\hat{U}$) энергий.	8	Блок №1 (решение задач) Десятиминутка «Вопрос-Ответ» Контрольная работа №1
Простейшие примеры решения уравнения Шредингера. Модельные задачи квантовой механики.	Движение частицы по окружности. Общая задача об атоме водорода, атоме гелия. Разделение переменных. Водородоподобный атом – постановка задачи, вид стационарного уравнения Шредингера в сферической системе координат. Угловая и радиальная части волновой функции. Главное квантовое число и его взаимосвязь с другими квантовыми числами. Задачи о наиболее вероятном и среднем расстояниях между ядром и электроном. Поверхность потенциальной энергии молекулярной системы, равновесная ядерная конфигурация и ее характеристики – длины химических связей и валентные углы. Вариационный принцип квантовой механики. Метод молекулярных орбиталей – основные положения и постановка задачи. Одноэлектронное приближение, понятие молекулярной орбитали. Приближение МО ЛКАО в методе Хартри-Фока, уравнения Рутана и методика их решения.	8	Блок №2 (решение задач) Контрольная работы №2
Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.	Аналитические базисные функции. Слейтеровские атомные орбитали. Гауссовские орбитали. Метод многоконfigurационного взаимодействия. Метод обобщенных валентных связей. Методы теории возмущения Меллера-Плессета. Метод связанных кластеров.	4	Работа в минигруппах на ПК

	Компьютерная реализация методов.		
Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Полуэмпирические уравнения Хюккеля как следствие неэмпирических уравнений Рутана. Определение качественных характеристик сопряженных и ароматических углеводородов. Инвариантность полуэмпирических методов AM1, PM3, PM7. Компьютерная реализация методов.	6	Работа в минигруппах на ПК Тестирование
Методы учета электронной корреляции.	Метод конфигурационного взаимодействия. Многоконфигурационные методы ССП. Метод связанных кластеров. Метод многочастичной теории возмущений. Метод функционала плотности. Общая характеристика. Компьютерная реализация методов.	2	Работа в минигруппах на ПК

5.3. Виды и формы письменных работ, предусмотренных при освоении дисциплины, выполняемые обучающимися самостоятельно

Работа по вычислительному практикуму выполняется за компьютерами в минигруппах. Ответ оформляется в электронном виде в формате *.doc или *.docx. Выравнивание текста по ширине. Шрифт Times New Roman. Размер 12. Параметры страницы соответствуют: верхнее 2см, нижнее 2см, левое 2см, правое 2см. Студенты отчитываются индивидуально по выполненной работе (типовые вопросы могут содержать темы из самостоятельной проработки).

Образец отчета

1. Визуализировать и сохранить оптимизированную 3d-молекулу в word-документе в декартовой и сферической системе координатах, также включить картинку для отчёта.
2. Подготовить входной файл для вычисления. Выполнить расчет, указанным методом в вычислительном практикуме. Для выполнения расчетов может быть использована следующая программа бесплатного распространения в академических целях: МОРАС (<http://openmoras.net/>). Структуру входного и выходного файла в программе МОРАС можно посмотреть на сайте (<http://openmoras.net/Manual/index.html>) в разделе «теория», «геометрия» и «примеры». Ключевые команды и описание представлено в разделе «keywords».
3. Для визуализации молекул можно использовать любую программу, имеющую бесплатное распространение в академических целях: Blender (<https://www.blender.org/>); MaSK (<http://ccmsi.us/mask/>); Jmol (<https://sourceforge.net/projects/jmol/>).
4. Составить таблицу следующих данных: длины связей, валентных углов, торсионных углов; кол-во связывающих МО, энергии граничных молекулярных орбиталей, величина энергетической щели; общая энергия, теплота образования, потенциал ионизации; объем и площадь сферы. Выписать величину электростатического дипольного момента молекулы, таблицу с зарядами атомов (в а.е. заряда) по Малликену и/или по Лёвдину, величину среднеквадратичного градиента (RMS Gradient). Добавить график зависимости «RMS Grad (или Energy) от количества шагов оптимизации (n)» для равновесной (минимизированной) структуры соединения. Сопоставить результаты расчетов с экспериментальными (анализ результатов научной литературы) и справочными данными. Указать наилучшую сходимость полученных данных с результатами эксперимента.

5. Сделать вывод о структуре и реакционной способности молекул, и соответствующих ионах (происходящих процессах). Установить активные центры в структурах.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При реализации различных видов учебной работы по дисциплине возможно применение электронного обучения и дистанционных образовательных технологий. В соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки реализация компетентностного подхода предусматривает использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (мини-опросы, компьютерное моделирование при реализации вычислительного практикума, разбор конкретных модельных ситуаций во внеурочной работе) с целью формирования и развития требуемых компетенций обучающихся.

6.1. Образовательные технологии

С целью формирования и развития профессиональных навыков у обучающихся в учебном процессе по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» предусмотрены следующие интерактивные формы проведения лекционных занятий:

- презентации с обучающими видеороликами (русский язык, английский язык);
- лекция с ошибками;
- обучающие вычислительные программы.

На практических занятиях предусмотрены следующие активные и интерактивные формы обучения в образовательном процессе:

- работа в минигруппах с применением компьютерных технологий (работа на ПК);
- тематические учебные конференции, самостоятельная работа студентов;
- учебные дискуссии на заданную тему, тестирование.

Удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах, составляет не менее 30% аудиторных семинарских занятий и 16% лекционных занятий. Необходимым условием успешного усвоения дисциплины является систематический текущий контроль знаний студентов в течение всего семестра, который осуществляется в форме мини-опросов, тестов по основным модулям курса, контрольных работ, выполнения и отчета практических заданий.

Подготовка электронных презентаций по основным блокам программы: «Постулаты квантовой механики», «Приближенные методы решения квантово-механических задач». Лекция с ошибками по теме «Примеры решения уравнения Шредингера для одноэлектронных и многоэлектронных систем». Демонстрационная лекция. Визуализация с примерами теоретических основ квантовой механики (на русском и английском языках). Предлагаются презентации проведения квантово-механических расчетов геометрических, зарядовых, термодинамических и кинетических параметров, как отдельных молекул, так и моделей их взаимодействий. Рассмотрены базовые программные комплексы, ориентированные на бесплатное распространение.

Учебные занятия по дисциплине могут проводиться с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) интерактивном взаимодействии обучающихся и преподавателя в режимах on-line и/или off-line в формах: видеолекций, лекций-презентаций, видеоконференции, собеседования в режиме чат, форума, чата, выполнения виртуальных практических и/или лабораторных работ.

6.2. Информационные технологии

Информационные технологии, используемые при реализации различных видов учебной и внеучебной работы:

- использование возможностей Интернета в учебном процессе (использование информационного сайта преподавателя (рассылка заданий, предоставление выполненных работ, ответы на вопросы, ознакомление учащихся с оценками и т.д.));
- использование электронных учебников и различных сайтов (например, электронные библиотеки, журналы и т.д.) как источников информации;
- использование возможностей электронной почты преподавателя (zoloto.chem@mail.ru);
- использование средств представления учебной информации (электронных учебных пособий и практикумов, применение новых технологий для проведения очных (традиционных) лекций и семинаров с использованием презентаций и т.д.);
- использование интегрированных образовательных сред, где главной составляющей являются не только применяемые технологии, но и содержательная часть, т.е. информационные ресурсы (доступ к мировым информационным ресурсам, на базе которых строится учебный процесс);
- использование виртуальной обучающей среды (или системы управления обучением LMS Moodle <http://moodle.asu.edu.ru/>) или иных информационных систем, сервисов и мессенджеров.

6.3. Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

- Лицензионное программное обеспечение:

Microsoft Office 2013 (Пакет офисных программ);
Microsoft Windows 7 Professional (Операционная система);
Adobe Reader (Программа для просмотра электронных документов);
SciLab (Пакет прикладных математических программ)
Moodle (Образовательный портал ФГБОУ ВО «АГУ»)
Google Chrome (Браузер)
Notepad++ (Текстовый редактор)

- Современные профессиональные базы данных, информационные справочные системы:

1. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех»: <https://biblio.asu.edu.ru> Учетная запись образовательного портала АГУ;
2. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента». Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через сеть Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретенным на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог в настоящее время содержит около 15000 наименований: www.studentlibrary.ru. Регистрация с компьютеров АГУ;
3. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги»: www.biblio-online.ru;
4. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <http://library.asu.edu.ru/>
5. Электронный каталог «Научные журналы АГУ»: <http://journal.asu.edu.ru/>
6. Электронно-библиотечная система elibrary: <http://elibrary.ru/>

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

7.1. Паспорт фонда оценочных средств

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» проверяется сформированность у обучающихся компетенций, указанных в разделе 3 настоящей программы. Этапность формирования данных компетенций в процессе освоения образовательной программы определяется последовательным освоением дисциплин и прохождением практик, а в процессе освоения дисциплины – последовательным достижением результатов освоения содержательно связанных между собой разделов, тем.

Таблица 5
Соответствие разделов, тем дисциплины, результатов обучения по дисциплине и оценочных средств

№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины	Код контролируемой компетенции (компетенций)	Наименование оценочного средства
1	Основы математического аппарата квантовой механики.	ОПК-4	Блок №1 (решение задач для самоконтроля) Десятиминутка «Вопрос-Ответ» Контрольная работа №1
2	Простейшие примеры решения уравнения Шредингера. Модельные задачи квантовой механики.	ОПК-4	Блок №2 (решение задач для самоконтроля) Контрольная работы №2
3	Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.	ОПК-4	Работа в минигруппах на ПК. Отчет
4	Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.	ОПК-4	Работа в минигруппах на ПК. Отчет Тестирование
5	Методы учета электронной корреляции.	ОПК-4	Работа в минигруппах на ПК. Отчет

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания

Для оценивания ответов (решение проблемной, ситуационной, научно-практической, учебной задачи) используются следующие критерии оценивания:

Таблица 6
Показатели оценивания результатов обучения в виде знаний

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	-дается комплексная оценка предложенной ситуации; -демонстрируются глубокие знания теоретического материала и умение их анализировать и применять; - последовательное, правильное выполнение всех видов

	заданий; -умение обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы; -привлекать дополнительную информацию, которая включает обзор научной литературы (журналы, материалы конференций и др.) с последующим описанием; -умение работать как в коллективе, так и самостоятельно.
4 «хорошо»	-дается комплексная оценка предложенной ситуации; -демонстрируются глубокие знания теоретического материала и умение их применять; - последовательное, правильное выполнение предложенных заданий; -возможны единичные ошибки, исправляемые самим студентом после замечания преподавателя; -умение обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы; -умение работать в коллективе, так и самостоятельно.
3 «удовлетворительно»	-затруднения с комплексной оценкой предложенной ситуации; -неполное теоретическое обоснование, требующее наводящих вопросов преподавателя; -выполнение заданий при подсказке преподавателя; - затруднения в формулировке выводов; -умение работать в коллективе, так и самостоятельно.
2 «неудовлетворительно»	- неправильная оценка предложенной ситуации; -отсутствие теоретического обоснования выполнения заданий;

Таблица 7

Показатели оценивания результатов обучения в виде умений и владений

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	-демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, - последовательно и правильно выполняет задания, -умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	-демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, -последовательно и правильно выполняет задания, -умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы, -допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	-демонстрирует отдельные, - несистематизированные навыки, -не способен применить знание теоретического материала при выполнении заданий, -испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, -выполняет задание при подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	-не способен правильно выполнить задание

7.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Ниже приводятся типовые тематические вопросы для практических занятий, тестовые задания, задачи и вопросы для самоконтроля, темы проблемных задач для подготовки к вычислительным экспериментам, над которыми целесообразно работать при изучении основного материала, также приведен перечень вопросов к экзамену.

На практических занятиях студенты закрепляют полученные знания теоретической части курса, который обучает постановке практико-ориентированных исследований как в области изучения структурных особенностей молекул, предсказания их реакционной способности, так и в области моделирования химических процессов взаимодействия, а также корректному выбору вычислительных схем, алгоритмов и методов квантовой химии. Необходимым условием успешного усвоения дисциплины является систематический текущий контроль знаний студентов в течение всего семестра, который осуществляется в форме мини-опросов или тестов по основным модулям курса и выполнения контрольных работ.

Раздел 1. Основы математического аппарата квантовой механики.

Тема 1.1. Введение в систему операторов.

1. Вопросы и задачи для самоконтроля «Блок №1»

1. Что такое волновая функция? В чем заключается её физический смысл?
2. Что означают координаты x, y, z в волновой функции $\Psi(x, y, z)$. Чем они отличаются от координат частицы в макром мире?
3. Каким условиям должна удовлетворять волновая функция частицы? В чем заключается физический смысл непрерывности, однозначности, ортогональности и нормированности волновой функции?
4. Оператор $\hat{A} = d/dx$. Чему равен оператор $(\hat{A} + x)^2$.
5. Установите, коммутируют ли между собой операторы $\hat{A}$ и $\hat{C}$:
а) $(\hat{A} + x)$, $(\hat{C} - x)$, где $\hat{A}, \hat{C} = d/dx$; б) $\hat{A} = \sin x$, $\hat{C} = d/dx$, $f = \sin x$.
6. Подействуйте оператором ∇^2 на функцию $\sin 2x \cdot e^{i2y} \cdot \cos z$.
7. Что называется волновой функцией? Перечислите условия, которым должна удовлетворять волновая функция.
8. Какие из указанных ниже операторов являются эрмитовыми:

а) d/dx ; б) id/dx ; в) $-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2}$; г) $\hat{A}_1 = \int \psi_1^*(1) \frac{1}{r_{12}} \psi_1(1) d\tau_1$.

9. Выполните действия с операторами:

а) $\left(\frac{d}{dx} + \frac{1}{x}\right)^3$; б) $\left(i\frac{d}{d\varphi} + 2\varphi\right)^2$; в) $\left(\frac{d}{dx} + x\right)^2$.

10. Установите, коммутирует ли гамильтониан частицы с:

а) оператором импульса; б) оператором потенциальной энергии.

11. Установите, выполняется ли соотношение $\hat{A}f = (\text{const})f$ для приведенных ниже функций и следующих операторов:

а) $f(x) = \sin kx$, $\hat{A} = d/dx$; б) $f(x) = \sin kx$, $\hat{A} = d^2/dx^2$;

в) $f(x) = e^{2x}$, $\hat{A} = d^2/dx^2$; г) $f(x) = 1/x$, $\hat{A} = x$.

Тема 1.2. Обоснование физического смысла постулатов квантовой механики.

1. Вопросы и задачи для самоконтроля «Блок №1»

1. Обоснуйте необходимость использования в квантовой механике понятие об операторах. Сформулируйте определение оператора.
2. Почему операторы квантовой механики должны быть линейными?
3. Почему операторы квантовой механики должны быть эрмитовыми?
4. Какой физический смысл имеет понятие ортогональности собственных функций оператора?
5. Какой физический смысл имеет понятие нормированности собственных функций оператора?
6. Предположим, что для некоторого оператора имеется множество собственных функций, отвечающих действительным собственным значениям. Установите, следует ли из этого, что данный оператор эрмитов?
7. Можно ли одновременно точно измерить кинетическую энергию частицы и потенциальную энергию? Полную энергию частицы и её потенциальную энергию? Ответ обоснуйте.
8. Используя принцип неопределенности, объясните, почему при переходе атома из возбужденных состояний в основное существует разброс в энергии излучаемых фотонов.
9. Рассчитайте величину произведения неопределенностей $\Delta x \cdot \Delta p_x$ для гармонического осциллятора, состояние которого описывается функцией $\Psi(x) = \sqrt{\alpha/\pi} \cdot \exp(-\alpha x^2/2)$.
10. Установите, как с течением времени будет расплываться волновой пакет, если электрон в момент времени $t = 0$ наблюдается в области $x_0 \sim 10^{-10}$ м. Рассчитайте чему будет равно Δx через 0,1 с; 1 с.
11. Рассчитайте величину произведения неопределенностей $\Delta x \cdot \Delta p_x$ для частицы в состоянии $\Psi_n(x) = \sqrt{2/L} \cdot \sin(n\pi x/L)$, где n – целое положительное число; L – параметр, $0 < x < L$.

2. Десятиминутная проверка «Вопрос-Ответ» по пройденному материалу

1. Дайте определение и перечислите основные свойства квантовых операторов.
2. Физический смысл соотношения неопределенностей Гейзенберга.
3. Дайте определение эрмитовым операторам.
4. Коммутационное соотношение и его физический смысл.
5. Всегда ли волновые функции имеют математический вид волн?
6. Дайте определение собственным функциям и собственным значениям.
7. Что такое волновая функция и в чем заключается её физический смысл?
8. Дайте определение квантовых операторов и приведите примеры физических величин.

Тема 1.3. Простейшие примеры применения квантовой механики.

1. Вопросы и задачи для самоконтроля «Блок №1»

1. Почему в трехмерной прямоугольной потенциальной яме состояния электрона вырождены?
2. Что в квантовой механике называют потенциальной ямой; потенциальным барьером; потенциальной стенкой?
3. Что называется квантовым осциллятором? Чем отличается квантовый гармонический осциллятор от классического?
4. Частица находится в состоянии, описываемом функцией $\Psi(x) = \sqrt{2/a} \cdot \sin(\pi x/a)$ ($0 < x < a$). Найдите вероятность пребывания частицы в области $a/3 < x < 2a/3$.
5. Волновая функция одномерной системы имеет вид $\Psi(x) = N e^{-x^2/2a^2}$, где N – нормировочный множитель; a – параметр. Нормируйте $\Psi(x)$ и рассчитайте вероятность обнаружения частицы в интервале $-a \leq x \leq a$.

6. В случае атома водорода в одномерном ящике определить значение квантового числа для уровня, энергия которого равна $3kT/2$ при 25°C для ящика длиной $10\text{ \AA}$.
7. Рассчитать первые три уровня энергии (в ккал/моль) для электрона в потенциальной яме шириной $5\text{ \AA}$ с бесконечно высокими стенками.
8. Найдите вероятность нахождения частицы в интервале шириной $0,1\text{ нм}$ в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной 1 нм вблизи точки с координатой x для $x = 0,25\text{ нм}$ и $n = 4$.
9. Найдите уровни энергии для прямоугольной потенциальной ямы глубиной $1,5\text{ а.е.}$ и шириной 5 а.е. длины.
10. Постройте график потенциала Морзе для $A = 10\text{ эВ}$, $\alpha = 2$.
11. Найдите энергии трех низших состояний для потенциала Морзе при $A = 2\text{ а.е.}$, $\alpha = 0,01$ и $m = 2000\text{ а.е.}$

2. Типовой комплект заданий контрольной работы №1

Вариант 1

1. Рассчитайте величину нормировочного множителя функции $\psi = N \cdot r \cdot e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi$ водородоподобного иона и обоснуйте, какой физический смысл заложен в данной величине.
2. Проверьте эрмитовость оператора $(-\hbar^2/2m)\Delta$, сформулируйте соответствующий постулат.
3. Покажите, что коммутатор $[M_z, \nabla^2] = 0$.
4. Как в квантовой механике понимается классическое выражение «частица движется» и, сформулируйте закон или постулат который свидетельствует об этом?

Вариант 2

1. Рассчитайте величину нормировочного множителя функции $N \cdot (r - r^2) \cdot e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$ водородоподобного иона и обоснуйте, какой физический смысл заложен в данной величине.
2. Проверьте коммутативность операторов $\hat{T} = (-\hbar^2/2m)\Delta$ и $\hat{p} = -i\hbar\Delta$, сформулируйте соответствующий постулат.
3. Установите, коммутирует ли гамильтониан частицы с оператором импульса.
4. Каким условиям должна удовлетворять волновая функция частицы и, какой физический смысл имеют стандартные условия: непрерывность, однозначность, ортогональность, нормированность функций?

Вариант 3

1. Рассчитайте величину нормировочного множителя функции $N \cdot r^2 \cdot e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \cdot \cos \theta$ в состоянии водородоподобного иона, и обоснуйте, какой физический смысл заложен в данной величине.
2. Сформулируйте принципы теории неопределенности Гейзенберга и найдите коммутатор $[\hat{x}, \hat{p}_x]$.
3. Найдите собственные функции и собственные значения оператора $-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2}$ на отрезке $[0, a]$ при $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$.
4. Какой математический смысл имеет утверждение, что умножение волновой функции на любую постоянную C не меняет состояние системы?

Раздел 2. Простейшие примеры решения уравнения Шредингера.

Модельные задачи квантовой химии.

Тема 2.1. Решение стационарного уравнения Шредингера.

1. Вопросы и задачи для самоконтроля «Блок №2»

1. Соотношение неопределенностей В.Гейзенберга и формулировка задачи о вероятностном подходе при описании движения микрочастиц. Волновая функция, ее физическое содержание и стандартные требования, предъявляемые к волновой функции. Эвристический “вывод” волнового уравнения Шредингера для свободной микрочастицы с корпускулярно-волновыми свойствами и его обобщение для частицы, движущейся в силовом поле. Понятие о стационарном уравнении Шредингера.
2. Результаты решения уравнения Шредингера для водородоподобного атома, структура волновых функций, квантовые числа, взаимосвязь между ними и их физическое содержание. Понятие об электронной орбитали, электронной плотности.
3. Основные закономерности радиального распределения электронной плотности. Наиболее вероятное и среднее положения электрона для разных состояний водородоподобного атома, размеры орбиталей.
4. Запишите наиболее общий вид волновой функции, описывающий электрон в поле протона. Почему угловая часть этой функции зависит от квантовых чисел l и m ? Почему радиальная часть данной функции зависит от n и l ?
5. Почему полная энергия электрона в атоме водорода отрицательна? Что означало бы положительность этой энергии?
6. В атоме водорода уровни энергии электрона при $n > 1$ вырождены по орбитальному квантовому числу l , а в многоэлектронных атомах это вырождение снимается. Почему?
7. Почему задачу о движении электрона в атоме водорода удастся решить точно, а для атома гелия это не возможно?
8. Что называется орбиталью, спин-орбиталью, атомной орбиталью?
9. Как связана энергия атомной орбитали с её узловой структурой?
10. Дайте определение спиновой функции. Перечислите свойства этой функции.
11. Почему возможно получение интенсивного монохроматического пучка света?
12. Рассчитать приведенную массу атома водорода.
13. Рассчитайте наиболее вероятное расстояние между электроном и протоном в $1s$ -состоянии атома водорода, используя не приведенную массу атома водорода, а массу электрона.
14. Рассчитайте энергию основного состояния атома водорода, используя не приведенную массу атома водорода, а массу электрона.
15. Определите значение r , соответствующее максимуму вероятности для электронной плотности у следующих орбиталей атома водорода, как функцию атомного номера Z (с учетом сферического элемента объема $4\pi r^2$): $1s$, $2s$, $2p_0$, $3d_0$.
16. Выполните нормировку функции $y = \cos^2\theta$ в сферической системе координат.
17. Изобразите радиальные функции атомных орбиталей $1s$, $2s$, $3s$, $4s$.
18. Вычислите среднее значение потенциальной энергии ($V(r) = -1/r$) для функции $2e^{-r}$.

Тема 2.2. Электронное состояние водородоподобного атома.

1. Вопросы и задачи для самоконтроля «Блок №2»

1. Определите возможные значения: а) полного углового момента для системы из двух частиц с $j_1 = 3$ и $j_2 = 4$; б) орбитального момента системы из двух электронов, находящихся на p -орбиталях; на d -орбиталях; один на p -орбитали, а другой на d -орбитали; в) спинового момента системы из четырех электронов.
2. Подействуйте оператором $\hat{l}_+$ на функцию $Y_{3,2}(\theta, \varphi)$.
3. Гамильтониан лёгкого атома и электронная конфигурация. D-функции Слэтера. L_z , S_z , операторы, их действие на D-функции. В-функции Слэтера. L^2 , S^2 , $L_{\pm}$, $S_{\pm}$

операторы и их действие на В и D – функции (для D-функций только действие $L_{\pm}$ и $S_{\pm}$ операторов). Нахождение В-функций в виде линейной комбинации D-функций.

4. Термы, правила Гунда для термов. Определение С-функций. Операторы J_z , J^2 и $J_{\pm}$ их действие на С- и В-функции. Мультиплетное расщепление.
5. Вычислите волновые функции атомных орбиталей Слэтера-Зенера для атомов IV-VI групп ПСХЭ.
6. Проверьте ортогональность слейтеровских орбиталей 1s и 2s в атоме Li ($\Psi_{1s} = 2,5e^{-2,7R}$; $\Psi_{2s} = 0,111Re^{-0,65R}$, где $R = r/a_0$).
7. Рассчитайте по правилам Слэтера первый и второй потенциалы ионизации атома углерода. Чему равны первые потенциалы ионизации атомов: кремния, гелия, кислорода, лития, натрия, калия, рубидия и цезия?
8. Докажите теорему Купменса.
9. Термы многоэлектронных атомов. Правила Хунда. Основной терм электронной конфигурации атома и одноатомного иона и методика его определения. Спектры многоэлектронных атомов, правила отбора. Особенности спектров атомов щелочных металлов (на примере лития и натрия).

Тема 2.3. Приближенные методы квантовой механики для стационарных состояний.

1. Вопросы и задачи для самоконтроля «Блок №2»

1. Оператор Гамильтона и волновая функция для молекулярных систем. Адиабатическое приближение в теории химической связи. Уравнение Шредингера для электронного и ядерного движений.
2. Покажите, что вариационным методом можно пользоваться для нахождения оценки сверху энергий не только основного, но и возбужденных состояний, если пробная функция ортогональна собственным функциям более низких состояний.
3. Вариационный принцип – основного неравенства $E \geq E_0$ для произвольной пробной функции. Вариационный принцип Ритца и его реализация для случая бинарной пробной функции.
4. Вычислите вариационную энергию атома гелия, выбрав в качестве пробной одноэлектронной функции функцию вида $\sqrt{\frac{(2\alpha)^3}{\pi^3}} \cdot \exp(-\alpha r^2)$.
5. Пробная нормированная волновая функция атома водорода в системе а.е. имеет вид $\tilde{\psi} = \sqrt{\frac{a^3}{\pi}} \exp(-\alpha r)$. При помощи вариационного метода определите, при каком a энергия системы минимальна.
6. Ненормированная пробная волновая функция основного состояния атома водорода равна $\tilde{\psi} = N \exp(-\alpha r^2)$. Определите, при каком a энергия системы минимальна. Чему равно среднее значение $\langle r \rangle$ и наиболее вероятное значение r для этой волновой функции? Сравните эти значения с полученными при помощи точной волновой функции. Чему равна минимальная ошибка расчета энергии основного состояния?
7. Согласно вариационному принципу модель двухъядерной молекулы может быть представлена в виде матрицы собственных значений гамильтонианов, описывающих взаимодействие $\begin{pmatrix} -18 & -4 \\ -4 & -15 \end{pmatrix}$ в случае ортогональности функций. Рассчитайте уровни энергий и запишите общий вид волновой функции.
8. Рассчитайте величину нелинейного параметра α для пробной функции вида $R(\alpha, r) = N \cdot r e^{-\alpha r}$.

9. Согласно вариационному принципу молекула хлорида натрия представлена в виде матрицы собственных значений гамильтонианов $\begin{pmatrix} -4 & -2 \\ -8 & -6 \end{pmatrix}$, описывающих взаимодействие в кристаллической решетке, величина интеграла перекрывания составляет 28%. Рассчитайте величины энергетических уровней и запишите вид волновой функции.
10. Размерность определителя Слэтера для молекулы H_2O : а) 6; б) 10; в) 8; г) 12.
11. Напишите определители Слэтера для возможных спиновых состояний многоэлектронного атома Li: $1s^2 2s^1$

Тема 2.4. Квантово-механические аспекты в химических задачах.

1. Вопросы и задачи для самоконтроля «Блок №2»

1. Метод Гайтлера-Лондона. Энергетические уровни и волновые функции двухатомных молекул (на примере иона H_2^+ и молекулы H_2). В чем отличие разрыхляющих орбиталей от связывающих и почему?
2. Постулаты Полинга. Гибридизация: sp^3 -, sp^2 -, sp - и другие типы гибридизации. Геометрия молекул. σ - и π -связи.
3. Какая из гибридных орбиталей sp , sp^2 или sp^3 обладает наибольшим дипольным моментом?
4. Определите величину дипольного момента перехода электрона между слэтеровскими орбиталями $2p_z$ и $2s$ атома кислорода.
5. Запишите электронный гамильтониан (в а.е.) для иона HeH^{2+} . Вычислите значение электронной энергии низшего энергетического состояния этого иона в пределе разъединенных атомов.
6. Постройте по методу валентных связей волновую функцию основного состояния молекул: а) He_2 ; б) Li_2 ; в) Be_2 ; г) C_2 ; д) O_2 .
7. Рассчитайте значение энергии (в а.е.) низшего энергетического состояния иона Li_2^{4+} в пределе разъединенных атомов, если известно, что равновесное расстояние составляет 2,312 а.е.
8. Чему равно расстояние от неподеленной электронной пары до ядра атома азота в молекуле аммиака NH_3 , если гибридная орбиталь неподеленной пары записана в виде $h = \frac{1}{2}[(2s) + 1,732(2p_z)]$, где $2s$ и $2p_z$ -слэтеровские орбитали атома азота.
9. Для молекулы воды найдите вид волновых функций, описывающих орбитали неподеленных электронных пар. Определите угол между неподеленными парами и тип гибридизации связей О-Н и неподеленных пар (валентный угол $\text{НОН} = 104,5^\circ$). Почему в молекулы воды угол НОН ($\approx 105^\circ$) больше угла FOF ($103,2^\circ$) в молекуле F_2O ?

2. Типовой комплект заданий контрольной работы №2

Вариант 1

1. Рассчитайте среднее значение энергии для состояния ротатора, описываемого волновой функцией $\Phi = N \cos^2 \theta$.
2. Рассчитайте собственные значения энергии (кДж/моль) двухъядерной гетерогенной ортогональной системы $\begin{pmatrix} -14 & -7 \\ -4 & -2 \end{pmatrix}$. Постройте графическую зависимость $\langle |\psi|^2 - r \rangle$ минимума энергии и обоснуйте причины появления на графике точек экстремума. Рассчитайте какое количество энергии необходимо затратить для того, чтобы произошел переход электрона с первой на вторую низшую орбиталь.
3. Почему задачу о движении электрона в атоме водорода удастся решить точно, а для атома гелия это не возможно?

Вариант 2

1. С помощью вариационного метода найти α в функции вида $\varphi_{nl} = \varphi_{21} = \frac{r}{2a_0\sqrt{6}} \exp\left(-\frac{\alpha \cdot r}{2a_0}\right)$, если $H = -\frac{1}{2r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{l}^2}{2r^2} - \frac{1}{r}$ (в а.е. энергии).
2. Рассчитайте энергию основного состояния двухэлектронного двухатомного гомоядерного иона и установите вид приближенной функции. Если известно, что величина кулоновского интеграла составляет -4 а.е., величина резонансного интеграла составляет -2 а.е., вклад от перекрывания атомных орбиталей составляет 0,28 а.е. Постройте графическую зависимость « $\psi_1 - r$ » минимума энергии и обоснуйте причины появления на графике точек экстремума.
3. Запишите общий вид волновой функции, описывающий электрон в поле протона. Почему радиальная часть данной функции зависит от n и l ?

Вариант 3

1. Постройте кривую потенциальной энергии (в эВ) с указанием трех низших энергетических состояний, если известно, что не варьируемый параметр составляет 1,05, масса молекулы 600 а.е., длина молекулы 540 нм, глубина потенциальной ямы составляет 4,76 эВ.
2. Рассчитайте энергию основного состояния иона H_2^+ при использовании в качестве основной функции $\psi = \xi^{3/2} \cdot (\pi^{-1/2} e^{-\xi r})$. Определите величину ξ , при которой достигается минимальное значение энергии.
3. Почему возбужденные состояния атома водорода вырождены?

Раздел 3. Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.

1. Вычислительный практикум на ПК

Тема №1: Понятие о базисных функциях для неэмпирических расчетов.

В работе предлагается провести с помощью программного комплекса GAMESS квантово-химический расчет энергии молекулы, изменяя мультиплетность и заряд системы. Отчет по работе должен состоять из трех частей, содержащих следующий материал:

1. Формулировка цели и задач квантово-химического расчета.
2. Характеристика метода расчета: обоснование выбора метода расчета и базиса для решения поставленной задачи. Описание способа построения базисного набора.
3. Интерпретация результатов расчета.

Задание

1. Вычислить полную и потенциальную энергии систем C_2 , C_4 , C_6 при следующих значениях мультиплетности $M = 1, 3, 5, 7$.
2. Найти мультиплетность, которой соответствует наименьшая энергия системы.
3. Дайте определение мультиплетности системы, заряда системы, схемы расчета величины мультиплетности.
4. Максимально точно найти энергию, геометрическую конфигурацию, мультиплетность основного состояния для систем C_2 , C_4 (прямоугольная форма), C_6 (циклическая форма).
5. Построить таблицу зависимости энергии основного состояния системы C_2 от используемого базиса. Расстояние между атомами принять равным 1,4 Å.

Раздел 4. Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.

1. Вычислительный практикум на ПК

Тема №2: «Расчет барьеров внутреннего вращения неэмпирическими и полуэмпирическими методами»

Для вычисления барьеров вращения проводят ряд расчетов с фиксированным торсионным углом. В результате определяется приближительная геометрия и энергия переходного состояния, соответствующая максимуму на энергетической кривой. Для расчета используются различные полуэмпирические и неэмпирические методы.

Пример расчета: Вычисление барьера вращения относительно двойной связи 2-бутена. Определение критериев выбора метода расчета для вычисления барьеров вращения. Изучение принципов построения зависимости энергии молекулярной системы от ее структуры.

Задачи расчета:

- 1) построить график зависимости энергии молекулы от диэдрального угла C-C=C-C;
- 2) вычислить термодинамические параметры E-, Z-2-бутена и переходного состояния;
- 3) вычислить энергию активации и константу скорости изомеризации.

C 1 1.5055654

C 2 1.3391947 1 118.0438127

C 3 1.4999549 2 122.5719520 1 **180.0000000** 0

H 2 1.0773805 3 123.4646696 1 **180.0000000** 0

H 3 1.0859564 2 122.5599595 4 **180.0000000** 0

H 4 1.0819998 3 114.2174549 5 -42.4221205 0

H 4 1.0877600 7 108.7171911 3 132.7547045 0

H 4 1.0904689 8 106.8201524 7 -113.8758803 0

H 1 1.0815736 2 108.9778867 5 -10.1163130 0

H 1 1.0793932 10 107.9179480 2 114.7055970 0

H 1 1.0878453 10 109.6943955 11 118.3573448 0

2. Итоговое тестирование

1. Математический оператор – это...

- а) некоторое числовое множество X;
- б) фактор, который показывает количество молекул участвующих в реакции;
- в) постоянная величина;
- г) закон, по которому одной функции f ставится в соответствие другая функция.

2. Из принципа неопределенности Гейзенберга следует, что нельзя с определенной точностью одновременно измерить:

- а) координату и импульс; б) координату и время; в) импульс и энергию системы; г) энергию системы и месторасположение; д) *предложите свой вариант*:

3. Волновая функция – это...

- а) величина, полностью описывающая состояние микрообъекта и любой квантовой системы; б) вероятность нахождения частицы в определенный момент времени t в точке пространства с координатами x, y, z ; в) величина, полностью описывающая состояние макрообъекта; г) функция волны.

4. Волновая функция обязана удовлетворять ряду требований:

- а) однозначности и конечности во всем пространстве переменных;
- б) непрерывности, однозначности и конечности во всем пространстве переменных;
- в) должна быть, как минимум дважды дифференцируема и однозначна;
- г) нормированности, непрерывности, однозначности и конечности во всем пространстве переменных.

5. Коммутатором называют:

- а) динамическую переменную;
- б) оператор $\hat{S}$, связывающий два оператора $\hat{A}$ и $\hat{C}$ математическим выражением $\hat{S} = [\hat{A}, \hat{C}] \equiv \hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A} = 0$;
- в) волновую функцию состояния;
- г) оператор $\hat{S}$, связывающий два оператора $\hat{A}$ и $\hat{C}$ математическим выражением $\hat{S} = [\hat{A}, \hat{C}] \equiv \hat{A}\hat{C} + \hat{C}\hat{A} = 0$.

6. Собственной функцией оператора $\hat{A}$ является такая функция f , которая удовлетворяет равенству:

- а) $\hat{A}f = k \cdot f$;
б) $\hat{A}f - \hat{C}f = 0$;
в) $\hat{A}f = a$;

г) (вписать собственный вариант ответа!).

7. Самосопряженный оператор – оператор, для которого справедливо соотношение:

- а) $\int f^* \cdot \hat{A} \cdot g d\tau = \int g \cdot (\hat{A} \cdot f^*) d\tau$; б) $\int f^* \cdot \hat{A} \cdot g d\tau = \int f^* \cdot (\hat{A} \cdot g^*) d\tau$;
в) $\int f^* \cdot \hat{A} \cdot g d\tau = \int g \cdot (\hat{A}^* \cdot f^*) d\tau$; г) $\int f^* \cdot \hat{A} \cdot g d\tau = \hat{A} \int f^* \cdot g d\tau$.

8. Укажите правильный вид оператора полной энергии для одноэлектронного атома:

- а) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \cdot c}{2 \cdot m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \hat{V}$; б) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_e} \Delta - \frac{Z \cdot e^2}{\hat{r}}$;
в) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_e} \Delta + \frac{Z^2 \cdot e^2}{\hat{r}}$; г) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{4 \cdot m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \hat{V} + H_0$.

9. Две физические величины могут быть измерены одновременно с любой наперед заданной степенью точности в том случае, если...

- а) общая волновая функция;
б) их операторы эрмитовы;
в) их операторы линейны и не зависят от времени;
г) их операторы коммутируют.

10. Собственные волновые функции φ_n и φ_m оператора $\hat{A}$ (имеющего дискретный спектр собственных значений A_n и A_m) называются ортонормированными, если выполняется условие:

- а) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = \delta_{mn}$; б) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = 0$;
в) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = 1$; г) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau \neq 0$.

11. Выясните, является ли функция $\psi(x, t) = A \cdot \sin kx \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}$ решением уравнения Шредингера?

- а) да; б) нет; в) частично.

12. Определите постоянную A_n для функции $\psi(x, t) = A_n \cdot \sin \frac{n \pi x}{L} \cdot e^{-i E_0 t / \hbar}$, которая определена в области $0 \leq x \leq L$.

- а) $\sqrt{\sin(n \pi x / L)}$; б) $\sqrt{3,14 / L}$; в) $\sqrt{2 / L}$; г) $\sqrt{L / 2}$.

13. Предположим, что положение электрона можно определить с точностью $0,1 \text{ \AA}$, какова будет при этом неопределенность измерения скорости электрона?

- а) $1,158 \cdot 10^5 \text{ м/с}$; б) $0,001158 \text{ м/с}$;
в) $1,158 \cdot 10^7 \text{ м/с}$; г) $0,1158 \text{ м/с}$.

14. Электрон заключен в полииновой молекуле длиной 20 нм . Рассчитайте энергию основного состояния?

- а) $1,506 \cdot 10^{-43} \text{ кДж}$; б) $1,506 \cdot 10^{-22} \text{ Дж}$;
в) $1,506 \cdot 10^{40} \text{ Дж}$; г) $1,506 \cdot 10^{19} \text{ кДж}$.

15. Найдите значение главного квантового числа n для электрона, находящегося в ящике длиной $5,0 \text{ \AA}$ и движущегося со скоростью $7,3 \cdot 10^6 \text{ м/с}$?

- а) 3; б) 2; в) 1; г) 4.

6 Найдите значение главного квантового числа n молекулы кислорода, массы $5,3 \cdot 10^{-26} \text{ кг}$, помещенной в ящик длиной $10\,000 \text{ \AA}$ и движущейся со скоростью 460 м/с ?

- а) 2; б) 3; в) 4; г) 1.
17. Песчинка массой $1,0 \cdot 10^{-7}$ кг помещена в потенциальную яму, длина которой 1,0 мм. Определите наименьшую энергию.
- а) $5,488 \cdot 10^{-55}$ Дж; б) $6,626 \cdot 10^{-24}$ кДж;
 в) $5,488 \cdot 10^{24}$ Дж; г) $6,626 \cdot 10^{-55}$ кДж.
18. Какова вероятность нахождения частицы в одномерном потенциальном ящике в интервале $L/4$ и $3L/4$, считая, что частица находится на низшем энергетическом уровне? (для упрощения задачи нормировочный множитель опущен)
- а) $0,988L$; б) $0,027L$; в) $0,750L$; г) $0,245L$.
19. Найдите значение главного квантового числа n частицы массой $1,0 \cdot 10^{-6}$ кг, находящейся в ящике длиной 1,0 мм и движущейся со скоростью 0,0010 м/с?
- а) 4; б) 2; в) 3; г) 1.
20. Нулевая энергия гармонического осциллятора составляет:
- а) $\frac{1}{2} h \nu$; б) $h \nu$; в) $\frac{3n}{2}$; г) $n + \frac{1}{2}$.
21. Радиальная составляющая описывает:
- а) поведение волновой функции при колебании системы относительно оси x ;
 б) поведение волновой функции при изменении угла относительно начального положения;
 в) поведение волновой функции при вращении системы вокруг оси z ;
 г) поведение волновой функции в зависимости от расстояния от протона.
22. Можно ли в принципе с помощью *вариационной процедуры* получить точное решение волнового уравнения?
- а) невозможно, потому что пробная волновая функция изначально включает в себя погрешность приближения;
 б) невозможно, так как точное решение можно получить только для одноэлектронной системы;
 в) безусловно, если варьируемые параметры c_i обеспечивают достаточную гибкость пробной волновой функции;
 г) возможно, даже в том случае, если варьируемые параметры c_i не обеспечивают необходимой гибкости.
23. Детерминант Слейтера показывает:
- а) способ размещения электронов по орбиталям;
 б) способ размещения только спаренных электронов по орбиталям;
 в) способ размещения электронов по орбиталям только возбужденного состояния;
 г) способ размещения электронов по орбиталям только для открытых систем.
24. Волновая функция основного состояния атома гелия, выраженная через определитель Слейтера, представлена в виде:
- а) $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{vmatrix} \psi_1(r_1)\alpha(1) & \psi_1(r_2)\alpha(2) \\ \psi_2(r_1)\alpha(1) & \psi_2(r_2)\alpha(2) \end{vmatrix}$; б) $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{vmatrix} \psi_1(r_1)\alpha(1) & \psi_1(r_2)\alpha(2) \\ \psi_1(r_1)\beta(1) & \psi_1(r_2)\beta(2) \end{vmatrix}$;
 в) $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{vmatrix} \psi_1(r_1)\beta(1) & \psi_1(r_2)\beta(2) \\ \psi_2(r_1)\beta(1) & \psi_2(r_2)\beta(2) \end{vmatrix}$; г) $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{vmatrix} \psi_1(r_1)\beta(1) & \psi_1(r_2)\beta(2) \\ \psi_2(r_1)\alpha(1) & \psi_2(r_2)\alpha(2) \end{vmatrix}$.
25. По методу ССП Хартри пренебрегают:
- а) кинетической энергией электронов;
 б) потенциальной энергией взаимодействия n электронов с ядром;
 в) расстоянием удаленных электронов до ядра;
 г) энергией межэлектронного отталкивания.
26. Полная энергия многоэлектронной системы по методу Хартри-Фока имеет следующий вид:

$$\text{B) } E_n = \sum_i^n H_i + \sum_{i \neq j}^n \sum_i^n (J_{ij} - K_{ij}); \quad \text{r) } E_n = 2 \sum_i^n H_i + \sum_{i \neq j}^n \sum_i^n (J_{ij} + K_{ij}).$$

27. Квантово-химический расчет потенциала ионизации методом самосогласованного поля производится:

- а) в виде разницы полной хартри-фоковской энергии атома и соответствующего катиона;
- б) в виде полной хартри-фоковской энергии соответствующего катиона;
- в) в виде полной хартри-фоковской энергии атома;
- г) в виде суммы полной хартри-фоковской энергии атома и соответствующего катиона.

28. В минимизации полной энергии системы по уравнению Рутаана участвуют:

- а) незанятые МО;
- б) занятые МО;
- в) только валентные электроны;
- г) электроны внутренней МО.

29. Укажите аналитический вид атомной орбитали Слейтера-Зенера:

$$\text{a) } \chi_{nlm} = N_n \cdot r^{n^*-1} \cdot \exp(-\xi \cdot r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi);$$

$$\textcircled{6}) \Psi_{nlm} = - \left[\frac{(n-l-1)!}{2n \cdot [(n+l)!]^3} \right]^{1/2} \cdot \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^{1+3/2} \cdot r^l \cdot \exp \left(- \frac{Zr}{na_0} \right) \cdot L_{n+l}^{2l+1}(q) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi);$$

$$\text{B) } \Psi_{nlm} = N_n \cdot \exp(-\xi \cdot r);$$

$$r) \chi_{nlm} = N_n \cdot \left(\frac{r}{a_0} \right)^{n^*-1} \cdot \left\{ \exp \left(-\xi_1 \cdot \frac{r}{a_0} \right) + \exp \left(-\xi_2 \cdot \frac{r}{a_0} \right) \right\} \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

30. Установите орбитальную экспоненту внешней электронной оболочки атома серы $[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4]$:

- а) 10,55; б) 4,150;
в) 5,925; г) 1,817.

31. Определите комбинацию поляризационных базисных наборов:

- а) 6-31G⁺, STO-3G, 3-21G;
 б) 6-31G(*d*), 3-21G^{*}, 6-311G(3*df*, 2*p*);
 в) 6-31G^{**}, 3-21G, 6-31⁺G(*d*, *p*);
 г) 6-311G(2*d*, *p*), STO-4G, 3-21⁺G.

32. Полуэмпирические методы в отличие от неэмпирических учитывают:

- а) только валентные электроны на атомных орбиталях валентных оболочек;
б) только остовные электроны атомных орбиталей;
в) валентные и невалентные электроны соответствующих атомов;
г) только спаренные валентные электроны атомных орбиталей, что вносит существенное приближение.

33. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля основан на ряде приближений: (возможно несколько вариантов ответа)

- а) пренебрежение двухэлектронными кулоновскими и обменными интегралами;
б) σ -электронным;
в) π -электронным;
г) пренебрежение одно- и двухэлектронными кулоновскими интегралами.

34. Установите определитель для молекулы изобутена C_4H_8 :

$$\begin{array}{l}
 \text{a)} \begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 1 & 0 & y \end{vmatrix}; \quad \text{б)} \begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}; \quad \text{в)} \begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 1 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 1 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}; \quad \text{г)} \begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 0 & 1 & 1 & y \end{vmatrix}.
 \end{array}$$

Раздел 5. Методы учета электронной корреляции.

1. Вычислительный практикум на ПК

Тема №3: Компьютерная реализация вычислительных методов: неэмпирические, полуэмпирические методы. Методы учета электронной корреляции.

Название: «Расчет энергии активации химической реакции»

Для расчета энергии активации реакции проводят ряд расчетов с фиксированным значением "координаты реакции". В качестве последней обычно выбирают расстояние между реакционными центрами реагента и субстрата. В результате определяется приблизительная геометрия и энергия переходного состояния, соответствующего максимуму на энергетической кривой. Экстремальные точки рассчитывают более точно – включают в базис поляризационные и диффузные функции, вычисляют корреляционную энергию. На профиле поверхности потенциальной энергии может присутствовать несколько максимумов и минимумов. Это справедливо и для достаточно простых реакций, особенно если рассматриваются сольватационные эффекты.

Например, в случае реакции SN2 на поверхности потенциальной энергии присутствуют два минимума и один максимум (рис.).

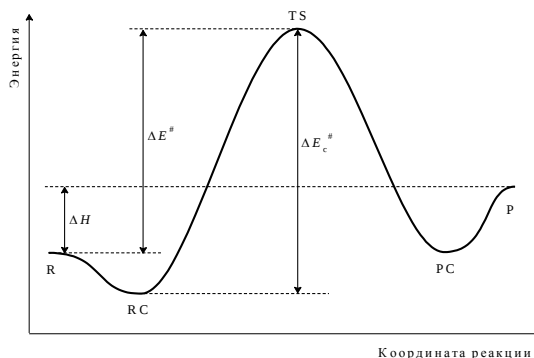


Рис. Типичный вид профиля поверхности потенциальной энергии SN2 реакции: R – реагенты, P – продукты, RC – комплекс реагентов, PC – комплекс продуктов, $\Delta E^\ddagger$ – энергия активации реакции, ΔH – энтальпия реакции, $\Delta E_c^\ddagger$ – величина центрального барьера.

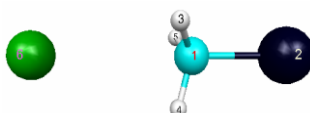
Цели расчета: Расчет энергии активации SN2 реакции бромметана с анионом хлора. Выбор метода расчета и модельной системы для вычисления энергии активации. Изучение принципов построения начальной геометрии молекулярной системы для исследования поверхности потенциальной энергии.

Задачи расчета: 1) построить график зависимости энергии от расстояния между атомом хлора и атомом углерода молекулы бромметана; 2) вычислить энергию активации реакции.

Расчет начинают с оптимизации геометрии комплекса реагентов (бромметан + хлорид-ион) и комплекса продуктов (хлорметан + бромид-ион). Это позволяет выбрать координату реакции, установить пределы и шаг её изменения, что определяет количество расчетов. Поскольку каждый расчет связан с оптимизацией геометрии, то от их количества зависит как общее время расчетов, так и часто сама возможность их проведения. В целях экономии времени большинство точек на кривой профиля поверхности потенциальной энергии рассчитывают в минимальном базисе. С наилучшей точностью вычисляют геометрии и энергии только экстремальных точек – минимумов

(комплексы, интермедиаты) и максимумов (переходные состояния), что позволяет получать более точное значение энергии активации реакции. Мощность современных персональных компьютеров позволяет в качестве простейшего расчета использовать неэмпирический метод Хартри – Фока в базисе RHF/6-31G или RHF/6-31G(d). Для уточнения геометрии наиболее часто применяют метод MP2 в расширенном базисе, содержащем поляризационные и диффузные функции, а далее рассчитывают точную электронную энергию с учетом возможно большей части корреляционной энергии, используя методы теории возмущений более высокого порядка или метод связанных кластеров. Критерием является максимальное использование возможностей доступного исследователю компьютера.

Для изучаемой реакции исходный файл для построения графика зависимости энергии от координаты реакции и грубого расчета переходного комплекса имеет следующий вид:



```
C
Br 1 1.99588
H 1 1.07349 2 106.8988
H 1 1.07356 3 111.9125 2 116.7619
H 1 1.07354 4 111.9156 3 -126.5581
Cl 1 3.500 2 179.000 3 55.0878
```

Вопросы для проработки

Экспериментальное значение энергии активации бромэтана с хлоридом лития в ацетоне: 18 ккал/моль. Почему так велико отличие расчета от эксперимента? Насколько велико различие энергии комплекса реагентов и изолированных реагентов и почему?

7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Методические материалы составляют систему текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины, закрепляют виды и формы текущего контроля, сроки проведения, а также виды промежуточной аттестации по дисциплине, ее сроки и формы проведения. В системе контроля указывается процедура оценивания результатов обучения по данной дисциплине при использовании бально-рейтинговой системы, показывается механизм получения оценки, основные положения БАРС, указывается система бонусов и штрафов, примерный набор дополнительных показателей.

Преподаватель, реализующий дисциплину, в зависимости от уровня подготовленности обучающихся может использовать иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

Таблица 8

Технологическая карта рейтинговых баллов по дисциплине

№	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий/баллы	Максимальное кол-во баллов	Срок представления
<i>Основной блок</i>				
1	Выполнение практических заданий			По расписанию
1.1	Подготовка отчета	2,5 балла за работу	10	По расписанию
1.2	Выполнение блоков	5 балла за блок	10	По расписанию
2	Зачетные единицы			По расписанию
2.1	Контрольные задания по разделам (2 к.р.)	1 балл за выполненное теор. задание	15	По расписанию

		(2 вопроса); 2 балла за выполненный расчет (2 задачи)		
2.2	Итоговое тестирование	0,5 баллов за правильный ответ	15	По расписанию
Промежуточный контроль			50	
3	Экзамен	50 баллов	50	По расписанию
ИТОГО			100	ЭКЗАМЕН

Таблица 9
Система штрафов

Показатели	Баллы
Опоздание (более двух раз)	-2
Не готов(а) к практической части занятий	-3
Нарушение учебной дисциплины	-2
Пропуск лекций без уважительной причины (за одно занятие)	-3
Пропуск практического занятия без уважительной причины (за одно занятие)	-3
Нарушение правил техники безопасности (в компьютерном классе)	-2

Таблица 10
Наличие бонусов

Показатели	Баллы
Отсутствие пропусков лекции	+2
Отсутствие пропусков на лабораторных занятиях	+2
Составление тематических сообщений, подготовка презентаций	+2
Активная работа студента на занятии, вклад студента на занятии	+1
Участие с докладами на научных конференциях по тематике дисциплины/смежным дисциплинам:	
- заочная	+1/+1
- очная	+2/+1
- внутривузовская	+1/+1
- городская	+2/+1
- региональная	+3/+1
- всероссийская	+4/+2
- международная (симпозиум)	+5/+3
Участие в учебно-производственных, научно-производственных выставках	+3

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) Основная литература:

1. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособ. для студентов вузов ... по химическим специальностям. - М.: Академия, 2008. - 384 с. (31 экз.)
2. Золотарева Н.В. Основы квантовой механики в вопросах и задачах. Модельные примеры квантовой химии: Учебно-методическое пособие. – Астрахань: Издатель: Сорокин Роман Васильевич, 2020. – 58 с. (8 экз. + Электронный вариант)
3. Боженко К.В. Основы квантовой химии: конспект лекций / К.В. Боженко. – М.: РУДН, 2010. – 124 с. ISBN 978-5-209-03510-7. Интернет-ресурс: <http://www.studentlibrary.ru>

4. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] / И. Майер; пер. с англ.- 2-е изд. (эл.). - М. : БИНОМ, 2014. - 384 с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323135.html>

б) Дополнительная литература:

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 3-е изд., испр. (эл.). - М.: БИНОМ, 2017. - 522 с. (Учебник для высшей школы) - ISBN 978-5-00101-502-4 Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015024.html>;
2. Громова Е.Ю. Строение атома. Химическая связь [Электронный ресурс]: учебное пособие / Громова Е. Ю. - Казань: Издательство КНИТУ, 2017. - 108 с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788222769.html>.
3. Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / И.Г. Каплан - М.: Лаборатория знаний, 2017. - 397 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015031.html>

в) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимый для освоения дисциплины

1. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех»: <https://biblio.asu.edu.ru/> Учетная запись образовательного портала АГУ;
2. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента». Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через сеть Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретенным на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог в настоящее время содержит около 15000 наименований: www.studentlibrary.ru. Регистрация с компьютеров АГУ;
3. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги»: www.biblio-online.ru;
4. Электронная библиотечная система IPRbooks. www.iprbookshop.ru

Профильные онлайн базы данных свободного доступа

1. ChemSpider: ресурс открытого доступа, обеспечивающий доступ к миллионам описаний химических структур. Интернет-ресурс: <http://www.chemspider.com/>
2. ChemSynthesis: база данных химических веществ, содержит также информацию по методам их синтеза и физическим свойствам, таким как плотность, точка плавления, точка кипения и т.д. Интернет-ресурс: <http://www.chemsynthesis.com/>
3. PubChem: поиск более 8 млн. соединений по различным критериям. Интернет-ресурс: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины включает в себя лекционную аудиторию и аудиторию для проведения практических занятий, компьютерный (дисплейный) класс. В учебном процессе для освоения дисциплины используются компьютерные, мультимедийные оборудования для проведения лекционных и практических работ. Программа включает в себя материалы лекционного курса, практических занятий и разделы для самостоятельной работы студентов. На практических занятиях прорабатываются наиболее сложные вопросы курса, осуществляется контроль успеваемости студентов.

При необходимости рабочая программа дисциплины может быть адаптирована для обеспечения образовательного процесса инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, в том числе для обучения с применением дистанционных образовательных технологий. Для этого требуется заявление студента (его законного представителя) и заключение психолого-медико-педагогической комиссии (ПМПК).

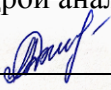
МИНОБРНАУКИ РОССИИ
АСТРАХАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОПОП


_____ А.В. Великородов

«31» мая 2021 г.

УТВЕРЖДЕНО

Заведующий кафедрой аналитической и
физической химии  Л.А. Джигола

«3» июня 2021 г.

ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ
в рабочей программе дисциплины
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ
по направлению подготовки **04.03.01 ХИМИЯ**
(направленность (профиль) **Медицинская и фармацевтическая химия**)
год приёма **2020** форма обучения **очно-заочная**
на **2021-2022** учебный год

1. В раздел 4 «Структура и содержание дисциплины» вносятся следующие изменения:
 - 1.1. скорректировано распределение часов, отводимых на самостоятельную работу студентов по темам дисциплины (таблица 2, таблица 3).
2. В раздел 5 «Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся» вносятся следующие изменения:
 - 2.1. в подразделе 5.1. скорректирован перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине и добавлено количество экземпляров, имеющих в наличии библиотеки АГУ.
 - 2.2. в подразделе 5.2. скорректировано количество часов, отводимых на самостоятельное изучение тем, а также изменена форма контроля работы (таблица 4).
 - 2.3. в подраздел 5.3. внесены сведения о формах выполнения и сдачи письменных работ, предусмотренных при освоении дисциплины (представлена структура отчета).
3. В раздел 6 «Образовательные и информационные технологии» вносится следующее дополнение: При реализации различных видов учебной работы по дисциплине могут использоваться электронное обучение и дистанционные образовательные технологии.
 - 3.1. В подраздел 6.1. Образовательные технологии вносятся следующее дополнение: Учебные занятия по дисциплине могут проводиться с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) интерактивном взаимодействии обучающихся и преподавателя в режимах on-line и off-line в формах: видеоконференции, лекций-презентаций, собеседования в режиме чат, выполнения виртуальных практических и самостоятельных работ.
 - 3.2. В подраздел 6.2. Информационные технологии вносятся следующее дополнение: При реализации различных видов учебной и внеучебной работы используются следующие информационные технологии: виртуальная обучающая среда (или система управления обучением LMS Moodle) или иные информационные системы, сервисы и мессенджеры.
 - 3.3. В подраздел 6.3. Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем вносятся следующее дополнение:
- Перечень лицензионного программного обеспечения (2021–2022 уч. г.)

- Платформа дистанционного обучения LMS Moodle (Виртуальная обучающая среда).

4. В раздел 7 «Фонд оценочных средств для текущего контроля и промежуточной аттестации» вносятся следующие изменения:

4.1. в пункт 7.1. «Паспорт ФОС» добавлена таблица соответствия разделов, тем дисциплины, результатов обучения по дисциплине и оценочных средств;

4.2. в пункте 7.2. добавлены таблицы с описанием показателей и критериев оценивания компетенций, описанием шкал оценивания;

4.3. в подразделе 7.3 приводятся все оценочные средства согласно разделам и темам дисциплины, обновлен перечень тематических вопросов и типовых контрольных заданий, добавлены вопросы тестирования, задания вычислительного практикума.

5 В раздел 8 «Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины» вносятся следующие изменения:

5.1. скорректирован перечень основной литературы, дополнительной литературы, а также ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимый для освоения данной дисциплины.

6. Добавлен раздел 9 «Материально-техническое обеспечение дисциплины» вносятся следующие сведения:

6.1. Добавлены сведения о необходимости адаптировать рабочую программу дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья.

Составитель _____

Н.В. Золотарева, к.т.н., доцент
кафедры аналитической и
физической химии