

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева»
(Астраханский государственный университет им. В. Н. Татищева)

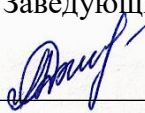
СОГЛАСОВАНО

Руководитель ОПОП

 Л.А. Джигола
« 15 » мая 2025 г.

СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой

 Л.А. Джигола
« 15 » мая 2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»

Составитель

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

Согласовано с работодателями:

**Лукин Н.В., директор МБОУ г. Астрахани
«Лицей №2 им. В.В. Разуваева»
Митрохина Л.Г., заместитель директора по
учебно-воспитательной работе МБОУ
г. Астрахани «СОШ №6»**

Направление подготовки / специальность

**44.03.05 Педагогическое образование
(с двумя профилями подготовки)**

Направленность (профиль) ОПОП

**ХИМИЯ И РУССКИЙ ЯЗЫК
КАК ИНОСТРАННЫЙ**

Квалификация (степень)

Бакалавр

Форма обучения

очная

Год приема

2025

Курс

3

Семестр

5

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” относится к обязательной части и осваивается в 5 семестре. Данная дисциплина логически встраивается в структуру ОПОП ВО 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 учебными дисциплинами:

- «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.

2.3. Последующие учебные дисциплины и (или) практики, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- органическая химия

- физическая химия

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

б) общепрофессиональных (ОПК): «ОПК-8» Способен осуществлять педагогическую деятельность на основе специальных научных знаний.

Таблица 1 – Декомпозиция результатов обучения

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине		
		Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине		
		Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
ОПК-8	ОПК-8.1. Применяет методы анализа педагогической ситуации, профессиональной рефлексии на основе специальных научных знаний, в том числе в предметной области	способы, методы, подходы для закрепления теоретических основ 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 для применения в педагогической деятельности.	приемами квантовой механики, методами, алгоритмами математического анализа при моделировании схем межмолекулярных взаимодействий и интерпретации результатов расчета для применения в педагогической деятельности.
	ОПК-8.2. Проектирует и осуществляет учебно-воспитательный процесс с опорой на знания предметной области, психолого-педагогические знания и научно-обоснованные закономерности организации образовательного процесса	методы, алгоритмы постановки вычислительного эксперимента в педагогической деятельности, способы обработки результатов и их интерпретации.	анализировать результаты экспериментов, наблюдений, измерений, анализировать результаты расчетов свойств веществ и материалов и использование их в педагогической деятельности.	способами систематизации и анализа результатов наблюдений, измерений, интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений для применения в педагогической деятельности,
	ОПК-8.3. Осуществляет и урочную и внеурочную деятельность в соответствии с предметной областью согласно освоенному профилю (профилям) подготовки	основных теоретических положений квантовой механики и квантовой химии, а также понимание возможностей и ограничений различных приближений и моделей	применять теоретические и полуэмпирические модели для обоснования строения веществ, прогнозирования их реакционной способности, планирования синтетических и исследовательских работ, а также для анализа и интерпретации экспериментальных данных	навыками использования современного программного обеспечения и специализированных баз данных для решения профессиональных задач в области квантовой химии и квантовой механики

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине		
		Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
	ОПК-8.4. Владеет методами научно-педагогического исследования в предметной области	основных постулатов и математического аппарата квантовой механики, понимание ключевых понятий и теоретических основ квантовой химии, включая методы решения уравнения Шредингера для одно- и многоэлектронных систем	применять теоретические и полуэмпирические модели для решения задач химической направленности, использовать современные вычислительные квантово-химические программы и стандартное программное обеспечение для расчетов	формулирования научно обоснованных гипотез, создания теоретических моделей явлений и процессов, а также применения методологии научного познания в профессиональной деятельности

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины в соответствии с учебным планом составляет 2 зачетные единицы (72 часа).

Трудоемкость отдельных видов учебной работы студентов очной формы обучения приведена в таблице 2.1.

Таблица 2.1. Трудоемкость отдельных видов учебной работы по формам обучения

Вид учебной и внеучебной работы	для очной формы обучения
Объем дисциплины в зачетных единицах	3
Объем дисциплины в академических часах	108
Контактная работа обучающихся с преподавателем (всего), в том числе (час.):	31
- занятия лекционного типа, в том числе:	15
- практическая подготовка (если предусмотрена)	-
- занятия семинарского типа (семинары, практические, <u>лабораторные</u>), в том числе:	15
- практическая подготовка (если предусмотрена)	-
- консультация (предэкзаменационная)	1
- промежуточная аттестация по дисциплине	-
Самостоятельная работа обучающихся (час.)	77
Форма промежуточной аттестации обучающегося (зачет/экзамен), семестр(ы)	Экзамен

Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий и самостоятельной работы, для каждой формы обучения представлено в таблице 2.2.

Таблица 2.2. Структура и содержание дисциплины (модуля)

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Контактная работа, час.							СР, час.	Итого часов	Форма текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации [по семестрам]
	Л		ПЗ		ЛР		КР/ КП			
	Л	в т.ч. ПП	ПЗ	в т.ч. ПП	ЛР	в т.ч. ПП				
Семестр 5										
Раздел 1. Основы математического аппарата квантовой механики										
Тема 1.1. Введение в систему операторов	1							10	11	Отчет по заданиям для самоконтроля №1 к лабораторно-вычислительной работе
Тема 1.2. Обоснование физического смысла постулатов квантовой механики	1				1			5	7	Отчет по заданиям для самоконтроля в moodle.asu-edu.ru к лабораторно-вычислительной работе
Тема 1.3. Простейшие примеры применения квантовой механики	1				1			5	7	
Раздел 2. Простейшие примеры решения уравнения Шредингера. Модельные задачи квантовой химии										
Тема 2.1. Решение стационарного уравнения Шредингера	1				1			5	7	Отчет по заданиям для самоконтроля №2 к лабораторно-вычислительной работе
Тема 2.2. Электронное состояние водородоподобного атома	1				1			5	7	
Тема 2.3. Приближенные методы квантовой механики для стационарных состояний	1				1			5	7	Отчет по заданиям для самоконтроля в moodle.asu-edu.ru к лабораторно-вычислительной работе Подготовка презентаций
Тема 2.4. Квантово-механические аспекты в химических задачах	1							5	6	
Раздел 3. Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул										
Тема 3. Понятие о базисных функциях. Неэмпирические методы изучения строения и свойств молекул	2				4			15	21	Контрольная работы №1 Выполнение лабораторно-вычислительной работы за ПК
Раздел 4. Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул										
Тема 4. Полуэмпирические методы изучения строения и свойств молекул	4				4			15	23	Отчет лабораторно-вычислительной работы за ПК Подготовка презентаций
Раздел 5. Методы учета электронной корреляции										
Тема 5. Математические	2				2			7	11	Подготовка презентаций

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Контактная работа, час.							СР, час.	Итого часов	Форма текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации <i>[по семестрам]</i>
	Л		ПЗ		ЛР		КР/ КП			
	Л	в т.ч. ПП	ПЗ	в т.ч. ПП	ЛР	в т.ч. ПП				
методы учета электронной корреляции в молекулах										Тестирование
Консультации									1	
Контроль промежуточной аттестации									-	Экзамен
ИТОГО за семестр:	15				15			77	107	
Итого за весь период	15				15			77	108	

Примечание: Л – лекция; ПЗ – практическое занятие, семинар; ЛР – лабораторная работа; КР – курсовая работа; СР – самостоятельная работа.

Таблица 3. Матрица соотнесения разделов, тем учебной дисциплины и формируемых компетенций

Разделы, темы дисциплины	Кол-во часов	Компетенции	Общее количество компетенций
		ОПК-8	
Раздел 1. Основы математического аппарата квантовой механики			
Тема 1.1. Введение в систему операторов	11	+	1
Тема 1.2. Обоснование физического смысла постулатов квантовой механики.	14	+	1
Тема 1.3. Простейшие примеры применения квантовой механики			
Раздел 2. Простейшие примеры решения уравнения Шредингера. Модельные задачи квантовой химии			
Тема 2.1. Решение стационарного уравнения Шредингера.	14	+	1
Тема 2.2. Электронное состояние водородоподобного атома			
Тема 2.3. Приближенные методы квантовой механики для стационарных состояний.	13	+	1
Тема 2.4. Квантово-механические аспекты в химических задачах			
Раздел 3. Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул			
Тема 3. Понятие о базисных функциях. Неэмпирические методы изучения строения и свойств молекул	21	+	1
Раздел 4. Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул			
Тема 4. Полуэмпирические методы изучения строения и свойств молекул	23	+	1
Раздел 5. Методы учета электронной корреляции			
Тема 5. Математические методы учета электронной корреляции в молекулах	11	+	1
Итого	107		

Краткое содержание каждой темы 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 $Y_{lm}(\theta, \phi)$) и радиальная ($R_{nl}(r)$) 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 $dW_{nl}(r)$ и угловое $dW_{lm}(\theta, \phi)$ 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 – 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.

Тема 3. Понятие о базисных функциях. Неэмпирические методы изучения строения и свойств 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.

Тема 4. Полуэмпирические методы изучения строения и свойств 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.

Тема 5. Методы учета электронной корреляции в молекулах. 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. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ПРЕПОДАВАНИЮ И ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

5.1. Указания для преподавателей по организации и проведению учебных занятий по дисциплине

Преподаватель должен активно непосредственно участвовать в учебном процессе и проводить подготовку к нему. Необходимость постоянной подготовки к лекциям, семинарским и практическим занятиям обусловлена потребностью отражать современные подходы, взгляды, данные по темам и разделам. Проводя подготовку к учебному процессу необходимо изучать современные методические рекомендации, результаты научных исследований, новые технологии и т.д. При реализации различных видов учебной работы преподаватель должен использовать образовательные технологии: создание интерактивных презентаций, обучающие компьютерные программы, технологии развития мышления (эффективная лекция, таблицы, работа в группах и т.д.).

В ходе подготовки лекции преподаватель должен разрабатывать план лекции, в котором должен определить те основные материалы, которые слушатели должны понять и записать. Содержание лекции должно быть организованным и четким, что делает усвоение материала доступным. Содержание лекции должно отвечать следующим требованиям: изложение материала от простого к сложному; от известного к неизвестному; логичность, четкость и ясность в изложении материала; возможность проблемного изложения; дискуссии и диалога в конце лекции с целью активизации деятельности слушателей; опора смысловой части лекции на подлинные факты, события, явления, статистические данные; тесная связь теоретических положений и выводов с практикой и профессиональной деятельностью. В ходе лекционного занятия преподаватель должен четко озвучить тему, представить план, кратко изложить цель, учебные вопросы. Раскрывая содержание учебных вопросов, акцентировать внимание на основных категориях, явлениях и процессах, особенностях их протекания. Следует также раскрывать сущность и содержание различных точек зрения и научных подходов к объяснению тех или иных явлений и процессов.

При изложении лекционного материала следует аргументировано обосновать собственную позицию по спорным теоретическим вопросам, приводя примеры, раскрывать положительный отечественный и зарубежный опыт. По ходу изложения, возможно,

задавать риторические вопросы и самому давать на них ответ. Преподаватель в целом не должен отвлекаться от излагаемого материала лекции. Преподаватель должен руководить работой слушателей по конспектированию лекционного материала, подчеркивать необходимость отражения в конспектах основных положений изучаемой темы.

Используемый во время лекции наглядный материал – слайды, таблицы, схемы, иллюстрации помогает вести конспекты и улучшает темп предложения материала лекций. В заключительной части лекции необходимо сформулировать общие выводы по теме, раскрывающие содержание всех вопросов, поставленных в лекции. Для закрепления материала, подготовки к семинарским и практическим занятиям и выполнения самостоятельной работы необходимо рекомендовать литературу, основную и дополнительную, в том числе учебно-методические материалы, а также электронные источники (Интернет-ресурсы).

Лабораторные (лабораторно-вычислительные) занятия способствуют закреплению знаний, полученных студентами в ходе обучения и самостоятельной работы, формированию компетенций, навыков в получении информации, приобретению умений провести ее обработку и анализ, овладению навыками планирования, анализа и управления. Общее требование при разработке тематики лабораторно-вычислительных занятий таково – этот вид аудиторных занятий должен научить студента правильно оценить и предвидеть развитие ситуации, управлять ее формированием, владению методами анализа, включая работу за ПК. На занятиях проводится отработка практических умений под контролем преподавателя. В конце каждого такого занятия преподаватель планирует 6-7 минут для подведения итогов. Он обращает внимание на то, как освоен учебный материал по теме в целом, анализирует типичные ошибки и недоработки студентов, акцентирует их внимание на значимость темы.

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

При подготовке к лабораторно-вычислительным работам студентам отводится время на самостоятельную работу, 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 электронного образования Астраханского государственного университета им. В.Н. Татищева (<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:

Решение задач для самоподготовки №1 к лабораторно-вычислительной работе включает темы 1.1 «Введение в систему операторов», 1.2 «Обоснование физического смысла постулатов квантовой механики» раздела 1 «Основы математического аппарата квантовой механики»;

Решение задач для самоподготовки №2 к лабораторно-вычислительной работе 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 аудиторные 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.

Выполнение лабораторно-вычислительной работы за ПК может осуществляться как в минигруппах, так и индивидуально (на усмотрение преподавателя) и предусматривает выполнение заданий вычислительного практикума по отдельным темам разделов: «Квантово-механические аспекты в химических задачах», «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; сформулированы выводы о реакционной способности соединения в различных условиях.

Подготовка презентаций осуществляется по ключевым направлениям практического применения неэмпирических, полуэмпирических методов, гибридных методов и методов, способных учитывать распределение электронной плотности. Полный перечень тем размещен в разделе «Темы для подготовки презентаций» в moodle.asu-edu.ru к выполнению лабораторно-вычислительной работы. Подготовка презентаций позволяет не только развивать навыки публичных выступлений, студенты учатся уверенно доносить идеи, информацию перед аудиторией, что полезно как в учебе, так и в будущей профессиональной деятельности.

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

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине:

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);
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. Электронный вариант: <https://biblio.asu-edu.ru/reader/book/2020092816145836600002063696>;
3. Соловьев М.Е. Компьютерная химия – М.: СОЛОН-Пресс, 2005. – 536 с. – (Библиотека студента);
4. Гавриленкова И.В. Введение в квантовую биофизику: учебное пособие для студентов медицинских вузов – Астрахань: Издательский дом «Астраханский университет», 2015.

5. Шагаутдинова, И.Т., Лихтер, А.М., Березин, К.В. Сборник проектных заданий к спецкурсу «Оптические свойства биомолекул»: учебное пособие – Астрахань: Издательский дом «Астраханский университет», 2019. – 98 с. Электронный вариант: <https://biblio.asu-edu.ru/reader/book/2020092311451952200002068392>;
6. 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>;
7. 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>.

Таблица 4. Содержание самостоятельной работы обучающихся

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Форма работы
Раздел 1. Основы математического аппарата квантовой механики		
Тема 1.1. Введение в систему операторов Свойства собственных значений и собственных функций линейных эрмитовых операторов. Матричное представление операторов. Коммутационные соотношения.	10	Оформление отчета по выполненным заданиям для самоконтроля №1
Тема 1.2. Обоснование физического смысла постулатов квантовой механики Простейшие операторы квантовой механики: гамильтон $\hat{H}$, операторы кинетической ($\hat{T}$) и потенциальной ($\hat{U}$) энергий.	10	Оформление отчета по выполненным заданиям в moodle.asu-edu.ru
Раздел 2. Простейшие примеры решения уравнения Шредингера. Модельные задачи квантовой химии		
Тема 2.1. Решение стационарного уравнения Шредингера Водородоподобный атом – постановка задачи, вид стационарного уравнения Шредингера в сферической системе координат. Угловая (сферические функции) и радиальная части волновой функции. Главное квантовое число 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. Тема 2.2. Электронное состояние водородоподобного атома Одноэлектронное приближение. Реализация принципа Паули при записи полной волновой функции многоэлектронного атома в виде определителя Слейтера для одноэлектронных спин-орбиталей.	10	Оформление отчета по выполненным заданиям для самоконтроля №2
Тема 2.3. Приближенные методы квантовой механики для стационарных состояний 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. Тема 2.4. Квантово-механические аспекты в химических	10	Оформление отчета по выполненным заданиям в moodle.asu-edu.ru

задачах 1. 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. 2. 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. 3. Метод молекулярных орбиталей – основные положения и постановка задачи. 4. Приближение МО ЛКАО в методе Хартри-Фока, уравнения Рутана и методика их решения. Электронная конфигурация молекулы и правила ее составления. 5. Постулаты Полинга. Гибридизация: sp^3 -, sp^2 -, sp - и другие типы гибридизации. Геометрия молекул. σ - и π -связи		Подготовка презентаций и докладов
Раздел 3. Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул		
Тема 3. Понятие о базисных функциях. Неэмпирические методы изучения строения и свойств молекул Понятие о базисных функциях для неэмпирических расчетов. Аналитические базисные функции. Слейтеровские атомные орбитали. Гауссовские орбитали. Атомные базисные наборы, характеристика. Молекулярные базисные наборы Попла. Другие базисные наборы. Многоуровневые экстраполяционные расчетные схемы. Компьютерная реализация неэмпирических методов. Точность вычисляемых результатов (структурных и энергетических параметров).	15	Написание контрольной работы №1 Отчет лабораторно-вычислительной работы за ПК
Раздел 4. Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул		
Тема 4. Полуэмпирические методы изучения строения и свойств молекул Основные требования к полуэмпирическим методам. Параметризация полуэмпирических методов. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. 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. Инвариантность полуэмпирических методов CNDO, MNDO, PM3, PM7. Компьютерная реализация полуэмпирических методов. Точность вычисляемых результатов (структурных и энергетических параметров).	15	Подготовка презентаций и докладов Отчет лабораторно-вычислительной работы за ПК
Раздел 5. Методы учета электронной корреляции		
Тема 5. Математические методы учета электронной корреляции в молекулах 1. Метод конфигурационного взаимодействия. 2. Многоконфигурационные методы самосогласованного поля. 3. Метод связанных кластеров. 4. Метод многочастичной теории возмущений. 5. Метод валентных схем. 6. Метод функционала плотности.	7	Подготовка презентаций и докладов

Цель и задачи

Цель:

Задачи:

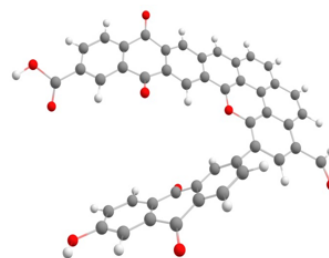
1.;
2.;
3.

Название подзаголовка

Раскрывается суть темы

.....
.....

.....



Приводятся по необходимости:
таблицы, графики, картинки, гиперссылки.

.....
.....
.....
.....

Название подзаголовка

Добавляете столько слайдов, чтобы презентация раскрывала суть темы. Обязательно используем нумерацию слайдов!

Старайтесь не допускать!!!

мелкий шрифт и большие объемы информации на слайде, белый шрифт на темном фоне, «кричащий, яркий» фон.

.....
.....
.....

Допустимо:

использование переходов по слайдам, гиперссылок, автоматическое перелистывание слайдов.

Название подзаголовка

Таблица 1. Если есть таблица, то к ней обязательно прописываем название

Название 1	Название 2	Название 3

1. Под таблицей тезисно дается характеристика;
2.
3. Перед таблицей обычно прописывают формулы.

Выводы

Сформулировать тезисно выводы по выбранной теме:

- ...
- ...
- ...

В результате,

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

Методические указания по составлению презентации

1. Формулирование темы. Тема должна быть не только актуальной по своему значению, но оригинальной, интересной по содержанию. Тема выбирается по желанию студентов из списка, предлагаемого преподавателем. Выбранная тема согласовывается с преподавателем. Тема также может быть сформулирована студентом самостоятельно, если имеет актуальную направленность.

2. Подбор и изучение основных источников по теме (как правило, не менее 8-10). Составление актуальных библиографических ссылок.

3. Разработка плана: План должен быть авторским, отражать мнение и содержать анализ проблемы.

4. Написание реферата.

5. Публичное выступление с результатами исследования.

Содержание презентации и работы в целом должно отражать

- знание современного состояния проблемы;
- обоснование выбранной темы;
- использование известных результатов и фактов;
- полноту цитируемой литературы, ссылки на работы ученых, занимающихся данной проблемой;
- актуальность поставленной проблемы;

- материал, подтверждающий научное, либо практическое значение в настоящее время.

План должен включать в себя: актуальность темы, указываются цели и задачи исследования, основной текст и заключение. Основная часть работы предполагает освещение материала в соответствии с планом. Основной текст желательно разбивать на логические части. В заключении излагаются основные выводы и основные умозаключения по теме исследования. Приводимые в тексте заимствованные факты и соображения должны сопровождаться ссылками на источник информации. Недопустимо просто скомпоновать реферат из кусков заимствованного текста. Все цитаты должны быть представлены в кавычках с указанием в скобках источника и страницы.

Текст реферата к презентации печатается на одной стороне листа. Размер левого поля 30 мм, правого – 15 мм, верхнего – 20 мм, нижнего – 20 мм. Шрифт – Times New Roman, размер – 14, межстрочный интервал – 1. Фразы, начинающиеся с новой строки, печатаются с абзацным отступом от начала строки (1 см). Реферат, выполненный небрежно, неразборчиво, без соблюдения требований по оформлению возвращается студенту без проверки с указанием причин возврата на титульном листе.

Защита тематического реферата с презентацией может проводиться на выделенном одном занятии в рамках часов учебной дисциплины или конференции, или по одному реферату при изучении соответствующей темы, либо по договоренности с преподавателем. Защита реферата студентом предусматривает доклад по реферату не более 5-7 минут, ответы на вопросы оппонента. На защите запрещено чтение текста реферата. Общая оценка за реферат выставляется с учетом оценок за работу, доклад, умение вести дискуссию и ответы на вопросы.

При оценивании презентации и реферативной работы учитываются следующие пункты: знание и понимание проблемы; умение систематизировать и анализировать материал, четко и обоснованно формулировать выводы; «трудозатратность» (объем изученной литературы, добросовестное отношение к анализу проблемы); самостоятельность, а также работа в команде (в случае, если предусмотрена групповая деятельность), способность к определению собственной позиции по проблеме и к практической адаптации материала, недопустимость прямого плагиата; выполнение необходимых формальностей (точность в цитировании и указании источника текстового фрагмента, аккуратность оформления).

Методические указания по выполнению лабораторно-вычислительной работы за ПК

Лабораторно-вычислительная работы за персональным компьютером может осуществляться как индивидуально, так и в минигруппах, в зависимости от наполняемости компьютерного класса и на усмотрение преподавателя. 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 строго индивидуально по выполненной работе (типовые вопросы могут содержать темы, отводимые на самостоятельную проработку).

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://openmopac.net/>). Структуру входного и выходного файла в программе МОРАС можно посмотреть на сайте (<http://openmopac.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 активные и интерактивные формы проведения лабораторных занятий:

- обучающие компьютерные программы по профилю подготовки, а также знакомство с электронными базами данных.
- работа в минигруппах с применением компьютерных технологий (работа за ПК);
- мини-опросы по текущей теме.

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 и др.

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.

Таблица 5. Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий

Раздел, тема дисциплины	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практическое занятие, семинар	Лабораторная работа
Раздел I. Основы математического аппарата квантовой механики			
Тема 1.1. Введение в систему операторов	Вводная лекция	Не предусмотрено	Выполнение лабораторно-вычислительной работы в мини-группах
Тема 1.2. Обоснование физического смысла постулатов квантовой механики	Лекция	Не предусмотрено	
Тема 1.3. Простейшие примеры применения квантовой механики	Обзорная лекция	Не предусмотрено	
Раздел II. Простейшие примеры решения уравнения Шредингера. Модельные задачи квантовой химии			
Тема 2.1. Решение стационарного уравнения Шредингера	Лекция	Не предусмотрено	Выполнение лабораторно-вычислительной работы в мини-группах
Тема 2.2. Электронное состояние водородоподобного атома	Лекция	Не предусмотрено	
Тема 2.3. Приближенные методы квантовой механики для стационарных состояний	Лекция	Не предусмотрено	
Тема 2.4. Квантово-механические аспекты в химических задачах	Лекция	Не предусмотрено	
Раздел III. Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.			
Тема 3. Понятие о базисных функциях. Неэмпирические методы изучения строения и свойств молекул	Обзорная лекция	Не предусмотрено	Выполнение лабораторно-вычислительной работы за ПК
Раздел IV. Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул			
Тема 4. Полуэмпирические методы изучения строения и свойств молекул	Обзорная лекция	Не предусмотрено	Выполнение лабораторно-вычислительной работы за ПК
Раздел V. Методы учета электронной корреляции			
Тема 5. Математические методы учета электронной корреляции в молекулах.	Лекция	Не предусмотрено	Выполнение лабораторно-вычислительной работы за ПК

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 или nv.zolotareva@asu-edu.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 (LMS Moodle «Электронное образование») или иных информационных систем, сервисов и мессенджеров.

6.3. Программное обеспечение, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

6.3.1. Программное обеспечение

Microsoft Office 2013	Пакет офисных программ
Платформа дистанционного обучения LMS Moodle	Виртуальная обучающая среда
Google Chrome	Браузер
Notepad++	Текстовый редактор
Avogadro	Молекулярный конструктор
МОРАС2016	Вычислительная химия

6.3.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» <http://dlib.eastview.com>
Имя пользователя: AstrGU
Пароль: AstrGU
2. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <https://library.asu-edu.ru/catalog/>
3. Электронный каталог «Научные журналы АГУ» <https://journal.asu-edu.ru/>
4. Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек <http://mars.arbicon.ru>
5. Электронная библиотечная система IPRbooks www.iprbookshop.ru
6. Электронно-библиотечная система BOOK.ru <https://book.ru>
7. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги» www.biblio-online.ru, <https://urait.ru/>
8. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех» <https://biblio.asu-edu.ru> Учётная запись образовательного портала АГУ
9. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» www.studentlibrary.ru
Регистрация с компьютеров АГУ
10. Единое окно доступа к образовательным ресурсам <http://window.edu.ru>
11. Министерство науки и высшего образования Российской Федерации <https://minobrnauki.gov.ru>
12. Министерство просвещения Российской Федерации <https://edu.gov.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 (модулю) «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 6. Соответствие разделов, тем дисциплины, результатов обучения по дисциплине и оценочных средств

Контролируемый раздел, тема дисциплины	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
Раздел 1. Основы математического аппарата квантовой механики		
Тема 1.1. Введение в систему операторов.	ОПК-8	Отчет по заданиям для самоконтроля №1 к лабораторно-вычислительной работе
Тема 1.2. Обоснование физического смысла постулатов квантовой механики. Тема 1.3. Простейшие примеры применения квантовой механики	ОПК-8	Отчет по заданиям для самоконтроля в moodle.asu-edu.ru к лабораторно-вычислительной работе
Раздел 2. Простейшие примеры решения уравнения Шредингера. Модельные задачи квантовой химии		
Тема 2.1. Решение стационарного уравнения Шредингера.	ОПК-8	Отчет по заданиям для самоконтроля №2 к лабораторно-вычислительной работе
Тема 2.2. Электронное состояние водородоподобного атома.		
Тема 2.3. Приближенные методы квантовой механики для стационарных состояний.	ОПК-8	Отчет по заданиям для самоконтроля в moodle.asu-edu.ru к лабораторно-вычислительной работе Подготовка презентаций
Тема 2.4. Квантово-механические аспекты в химических задачах		
Раздел 3. Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул		
Тема 3. Понятие о базисных функциях. Неэмпирические методы изучения строения и свойств молекул	ОПК-8	Контрольная работы №1 Выполнение лабораторно-вычислительной работы за ПК
Раздел 4. Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул		
Тема 4. Полуэмпирические методы изучения строения и свойств молекул	ОПК-8	Отчет лабораторно-вычислительной работы за ПК Подготовка презентаций
Раздел 5. Методы учета электронной корреляции		
Тема 5. Математические методы учета электронной корреляции в молекулах	ОПК-8	Подготовка презентаций Тестирование

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

Таблица 7. Показатели оценивания результатов обучения в виде знаний

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует глубокое знание теоретического материала, умение обоснованно излагать свои мысли по обсуждаемым вопросам, способность полно, правильно и аргументированно отвечать на

	вопросы, приводить примеры
4 «хорошо»	демонстрирует знание теоретического материала, его последовательное изложение, способность приводить примеры, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует неполное, фрагментарное знание теоретического материала, требующее наводящих вопросов преподавателя, допускает существенные ошибки в его изложении, затрудняется в приведении примеров и формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	демонстрирует существенные пробелы в знании теоретического материала, не способен его изложить и ответить на наводящие вопросы преподавателя, не может привести примеры

Таблица 8. 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, испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, выполняет задание по подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	не способен правильно выполнить задания

7.3. Контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения по дисциплине

Ниже приводятся типовые тематические задачи и вопросы для самоконтроля, тестовые задания, темы для подготовки презентаций, задания для подготовки к оформлению лабораторно-вычислительной работы, также приведен перечень вопросов к экзамену.

На лабораторных занятиях студенты закрепляют полученные знания теоретической части курса, который обучает постановке лабораторно-вычислительной работы 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 механики и квантовой химии. Необходимым условием успешного усвоения дисциплины является систематический текущий контроль знаний студентов в течение всего семестра, который осуществляется в форме мини-опросов при отчете заданий для самоконтроля (блоков), выполнения контрольной работы и тестирования по основным модулям курса.

Раздел 1. Основы математического аппарата квантовой механики

Тема 1.1. Введение в систему операторов

1. Задания для самоконтроля №1 «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? Перечислить 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

Тема 1.3. Простейшие примеры применения квантовой механики

2. Задания для самоконтроля в moodle.asu-edu.ru

[1] Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособ. для студентов вузов по химическим специальностям. - М.: Академия, 2008. - 384 с.

стр. 11	Упражнения 1 – 5
стр. 33	Упражнения 1, 2, 6
стр. 39	Упражнения 2, 3

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 $A = 2$ а.е., $\alpha = 0,01$ и $m = 2000$ а.е.

Раздел 2. Простейшие примеры решения уравнения Шредингера.

Модельные задачи квантовой химии

Тема 2.1. Решение стационарного уравнения Шредингера.

Тема 2.2. Электронное состояние водородоподобного атома.

1. Задания для самоконтроля №2 «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 невозможно?
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 $2e^{-r}$.
19. 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.
20. Подействуйте оператором $\hat{L}_+$ на функцию $Y_{3,2}(\theta, \varphi)$.

Тема 2.3. Приближенные методы квантовой механики для стационарных состояний

2. Задания для самоконтроля в moodle.asu-edu.ru

[1] Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособ. для студентов вузов по химическим специальностям. - М.: Академия, 2008. - 384 с.

стр. 53	Упражнения 1 – 9
стр. 63	Упражнения 1 – 6

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

3. Темы для подготовки презентаций

1. 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.

2. 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.
3. Метод молекулярных орбиталей – основные положения и постановка задачи.
4. Приближение МО ЛКАО в методе Хартри-Фока, уравнения Рутана и методика их решения. Электронная конфигурация молекулы и правила ее составления.
5. Постулаты Полинга. Гибридизация: sp^3 -, sp^2 -, sp - и другие типы гибридизации. Геометрия молекул. σ - и π -связи.

Раздел 3. Неэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул

Тема 3. Понятие о базисных функциях. Неэмпирические методы изучения строения и свойств молекул

1. Типовой перечень тем для подготовки к контрольной работе

Постулаты квантовой механики.

Операторные отношения. Динамические операторы.

Простейшие примеры квантовой механики.

Одномерная модель движения частицы.

Трехмерная модель движения частицы.

Модель движения частицы в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Модель движения частицы в прямоугольной потенциальной яме через потенциальные барьеры.

Туннельный эффект.

Модель гармонического осциллятора.

Модель ангармонического осциллятора.

Модель движения частицы по окружности.

Модель движения частиц по типу жесткого ротатора.

1. Примерный комплект заданий контрольной работы

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 функции?

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?

Тема 3. Понятие о базисных функциях. Неэмпирические методы изучения строения и свойств молекул

2. Лабораторно-вычислительная работы за ПК

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

В работе предлагается провести 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 $1,4 \text{ \AA}$.

Раздел 4. Полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул

Тема 4. Полуэмпирические методы изучения строения и свойств молекул

1. Лабораторно-вычислительная работы за 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

Тема 4. Полуэмпирические методы изучения строения и свойств молекул

2. Перечень тем для подготовки презентаций

Основные требования к полуэмпирическим методам. Параметризация полуэмпирических методов. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля.

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.

Раздел 5. Методы учета электронной корреляции

Тема 5. Математические методы учета электронной корреляции в молекулах

1. Перечень тем для подготовки презентаций

1. Метод конфигурационного взаимодействия.
2. Многоконфигурационные методы самосогласованного поля.
3. Метод связанных кластеров.
4. Метод многочастичной теории возмущений.
5. Метод валентных схем.
6. Метод функционала плотности.
7. Общая характеристика. Сравнительный анализ методов, учитывающих корреляционные эффекты.

Тема 5. Математические методы учета электронной корреляции в молекулах

2. Примерный перечень тестовых заданий

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

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

- а) да; б) нет; в) частично.

12. Определите постоянную A_n для функции $\psi(x, t) = A_n \cdot \sin \frac{n\pi x}{L} \cdot e^{-iE_0 t/\hbar}$, 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 Å, какова будет при этом неопределенность измерения скорости электрона?

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

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

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

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

- а) 3; б) 2; в) 1; г) 4.

16. Найдите значение главного квантового числа n молекулы кислорода, массы $5,3 \cdot 10^{-26}$ кг, помещенной в ящик длиной 10 000 Å 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:

$$r) \Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{vmatrix} \psi_1(r_1)\beta(1) & \psi_1(r_2)\beta(2) \\ \psi_2(r_1)\alpha(1) & \psi_2(r_2)\alpha(2) \end{vmatrix}.$$

г) энергией межэлектронного отталкивания.

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 :

а) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 1 & 0 & y \end{vmatrix}$; б) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}$; в) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 1 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 1 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}$; г) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 0 & 1 & 1 & y \end{vmatrix}$.

Перечень вопросов и заданий, выносимых на экзамен

1. Предпосылки возникновения квантовой механики. Особенности движения микрочастиц. Антисимметризация волновой функции для системы электронов. Представление волновой функции системы электронов в виде определителя.
2. Принцип неопределенности – как один из основных принципов квантовой механики. Физический смысл и простейшие оценки. Примеры решения задач.
3. Основные постулаты квантовой механики. Показатель Кронекера. Понятие и физический смысл волновой функции. Нормированность волновых функций.
4. Операторы физических величин (координат, импульсов, кинетической, потенциальной энергии и др.). Свойства операторов (коммутативный закон, ассоциативный закон, закон сложения, произведения, оператор дифференцирования и др.). Примеры решения задач.
5. Собственные функции и собственные значения операторов. Матричное представление операторов. Свойства самосопряженных операторов. Примеры решения задач.
6. Примеры решения уравнения Шредингера квантовой механикой. Расчет энергии при одномерном и трехмерном движении свободной частицы. Основные условия нахождения частицы в одномерной потенциальной яме, вид волновой функции. Примеры решения задач.
7. Задача о прямоугольном потенциальном барьере, необходимые условия для решения уравнения Шредингера. Вид волновой функции при движении частицы в ограниченном пространстве барьером. Примеры решения задач.
8. Задача о линейном гармоническом осцилляторе. Расчет энергии нулевых колебаний и графики собственных функций гармонического осциллятора. Примеры решения уравнения Шредингера.
9. Стационарное уравнение Шредингера для атома водорода. Причина разделения переменных. Связь между сферическими и декартовыми координатами. Примеры решения задач.
10. Классификация и форма представления волновой функции водородоподобных АО. Пространственная структура атомных орбиталей. Зависимость радиальной части волновой функции от расстояния (наличие узловых точек). Вероятность нахождения электрона в пространстве между значениями r (радиальная функция распределения). Графическое представление угловых частей. Примеры решения задач.
11. Спектр водородоподобного атома. Формульные соотношения. Уровни энергии. Введение в систему правила отбора.

12. Квантовые числа и их физический смысл. Главное квантовое число и основное понятие об угловых моментах атома. Орбитальное квантовое число. Магнитное квантовое число и понятие о спин электрона. Примеры решения задач.
13. Вариационный подход при отыскании собственных значений и собственных функций для стационарных состояний. Вариационный метод Ритца. Ортогональная и неортогональная схемы расчетов. Примеры решения задач.
14. Варьируемые и не варьируемые линейные параметры. Примеры решения задач.
15. Теория малых возмущений при отыскании собственных значений и собственных функций для стационарных состояний в отсутствие и при наличии вырождения.
16. Приближенные подходы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных систем. Сравнительная характеристика вариационного метода и теории возмущения (принципиальные отличия и сходства при решении уравнения Шредингера).
17. Решение проблем, связанных с исследованием многоэлектронных атомов. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Механическая модель молекул. Поверхность потенциальной энергии (двухатомные, трехатомные молекулы).
18. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока. Пределы применимости метода Хартри-Фока. Уравнения, определяющие одноэлектронные функции. Определитель Слейтера в системе ССП. Примеры реализации метода.
19. Электронные оболочки. Молекулы с закрытыми оболочками. Орбитали Хартри-Фока. Представление молекулярных орбиталей в виде линейной комбинации атомных орбиталей.
20. Вывод полной энергии атома методом Хартри-Фока-Рутаана. Матрицы плотности. Введение в основные, кулоновские и обменные интегралы. Метод Рутаана для закрытых и открытых оболочек. Трудности, возникающие при расчетах.
21. Метод валентных схем. Достоинства и недостатки метода. Описание электронных конфигураций атомов. Расчет молекулы водорода по методу Гейтлера-Лондона. Собственная функция и энергия основного состояния. Энергия молекулы водорода в зависимости от расстояния между ядрами. Методы уточнения расчетов. Распределение электронной плотности методом локализованных электронных пар. Основные положения метода локализованных электронных пар.
22. Введение в систему молекулярных орбиталей в виде линейной комбинации атомных орбиталей. Метод ССП МО ЛКАО и его применимость. Базисные орбитали. Слэтеровские атомные орбитали. Двухэкспонентные слэтеровские орбитали.
23. Гауссовские орбитали. Выбор базисных атомных функций. Базисные наборы.
24. Метод функционала плотности, химические концепции. Основы метода Кона-Шэма для молекул. Основы метода Кара-Парринелло для молекул.
25. Методы учета электронной корреляции. Разложение по конфигурациям. Корреляционная энергия и методы ее расчета.
26. Конфигурационное взаимодействие. Метод много-конфигурационного взаимодействия. Отличительные особенности вычислительных схем.
27. Классификация электронных состояний молекул и молекулярных орбиталей по симметрии. σ - и π -орбитали, π -электронное приближение. Характеристика связывающих и разрыхляющих орбиталей, локализованных молекулярных орбиталей.
28. Основные требования к полуэмпирическим методам. Нулевое дифференциальное перекрывание. Инвариантность полуэмпирических методов. Методы полного (CNDO) и частичного (INDO) пренебрежения дифференциальным перекрыванием.
29. Метод модифицированного пренебрежения двухатомным дифференциальным перекрыванием (MNDO) и его модификации – методы PM3, PM7. Области применения полуэмпирических методов.
30. Теоретические основы метода Хюккеля. Расширенный метод Хюккеля. Решение задач реакционной способности гомоядерных систем. Решение задач реакционной

способности гетероядерных систем. Возможности и ограничения применения метода Хюккеля.

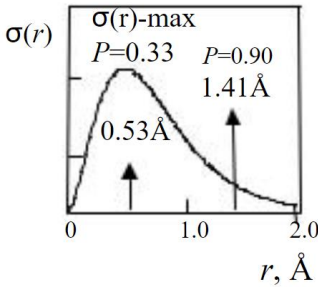
Таблица 9. Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
ОПК-8 – Способен осуществлять педагогическую деятельность на основе специальных научных знаний				
1.	Задание закрытого типа	Выберите один правильный вариант ответа: 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.	а	1
2.		Выберите правильный вариант ответа (возможно наличие нескольких правильных вариантов): 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.	в, г	1
3.		Выберите один правильный вариант ответа: Установите определитель для молекулы изобутена C_4H_8 :	а	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		а) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 1 & 0 & y \end{vmatrix}$ б) в) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}$ г) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 1 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 1 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}$ $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 0 & 1 & 1 & y \end{vmatrix}$		
4.		Выберите один правильный вариант ответа: Собственные волновые функции φ_n и φ_m являются <u>ортонормированными</u>, 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) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau \neq 0$	а	1
5.		Выберите один правильный вариант ответа: Метод молекулярных орбиталей Хюккеля основан на ряде приближений: а) σ-электронным б) пренебрежение интегралами межэлектронного отталкивания в) π-электронным	б	1
6.	Задание открытого типа	Запишите развернутый ответ: Что описывает радиальная функция в теории строения атома и с какими квантовыми числами связана функция?	Радиальная функция распределения описывает изменения плотности как функции расстояния от выбранной частицы. В теории строения атома это	5

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			соответствует вероятности нахождения электрона в элементе объема от расстояния до ядра. А поскольку, главное квантовое число определяет разрешенные квантовые значения полной энергии электрона и характеризует размер электронных орбиталей, что является мерой расстояния между электроном и ядром. Таким образом, радиальная функция связана с главным квантовым числом. Радиальная функция также связана с орбитальным квантовым числом поскольку определяет возможные квантовые значения орбитального момента количества движения электрона и связана с кинетической энергией.	
7.		Запишите развернутый ответ: Что описывает функция углового распределения в теории строения атома и с какими квантовыми числами связана функция?	В теории строения атома функция углового распределения определяет пространственную конфигурацию простейших форм орбиталей. Таким образом, это соответствует орбитальному квантовому числу. Угловая функция также связана с магнитным квантовым числом, которое определяет разрешенные направления в пространстве вектора орбитального момента количества движения.	5
8.		Решить задачу и опишите этапы вычисления: Вычислите декартовы координаты хлорноватистой кислоты HOCl . Известны радиусы по Полингу (Å) для $\text{H} = 0,3$; $\text{O} = 0,66$, $\text{Cl} = 0,99$.	Пронумеруем атомы и центрируем на координатной сетке. Поскольку молекула укладывается в плоскости xy , то целесообразно упростить вычислительную модель. Таким образом, связь O^1 -	5-8

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			Cl^2 будет вытянута вдоль оси x, а H будет направлен в третью четверть под углом 104 градуса. Что приблизительно соответствует валентному углу в молекуле воды. Для O^1 координаты соответствуют (0;0;0). Для Cl^2: $x=(R(\text{O})+R(\text{Cl}))\cdot\cos(0)=$ $=(0,66+0,99)\cdot 1=1,65$ $y=(R(\text{O})+R(\text{Cl}))\cdot\sin(0)=$ $=(0,66+0,99)\cdot 0=0$ $z=0.$ Для H^3: $x=(R(\text{H})+R(\text{O}))\cdot\cos(180-$ $104)=$ $=(0,3+0,66)\cdot 0,24=0,23$ $y=(R(\text{H})+R(\text{O}))\cdot\sin(76)=$ $=(0,3+0,66)\cdot 0,97=0,93$ $z=0.$ Следовательно, атомы в молекуле хлорноватистой кислоты имеют следующие декартовы координаты: O^1 (0;0;0) Cl^2 (1,65;0;0) H^3 (0,23;0,93;0)	
9.		Решить задачу и определить вычислительную модель: Электрон заключен в полиионовой молекуле длиной 20 нм. Рассчитайте энергию основного состояния?	Движение электрона в полиионовой молекуле можно представить в рамках модели движения частицы в прямоугольном ящике с бесконечно высокими стенками. Тогда, энергию электрона в основном состоянии можно вычислить по формуле: $E_1=(\pi^2\cdot n^2\cdot (h/2\pi)^2)/(2\cdot m_e\cdot a^2).$ Таким образом, $E_1=((3,14)^2\cdot 1^2\cdot (1,054\cdot 10^{-34}$ $\text{Дж/с}))/((2\cdot 9,11\cdot 10^{-31}$ $\text{кг})\cdot (20\cdot 10^{-9}\text{м})^2)=1,503\cdot 10^{-22}$ Дж	5-8
10.		Запишите развернутый ответ: Ниже представлен график функции радиального распределения электронной плотности для основного состояния атома водорода. О чем свидетельствует	Функция $\sigma(r)$ имеет максимум при $r=0,53\text{\AA}$, что свидетельствует максимальной вероятности нахождения электрона на расстоянии отличном от нуля. Данное расстояние	5-8

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		максимум на кривой и значение $1,41\text{\AA}$? 	совпадает с радиусом первой орбиты по теории Бора. Однозначно точно указать объем пространства, в котором вероятность нахождения электрона будет равна 1 (100%), невозможно, как невозможно и указать, в какой точке пространства находится электрон в данный момент. Поэтому указывается объем пространства, в пределах которого вероятность нахождения электрона составляет величину 0,9 (90%). Такая область пространства называется орбиталью электрона, в отличие от орбиты в классической теории. Для основного состояния атома водорода радиус орбитали составляет $1,41\text{\AA}$.	
11.	Задание комбинированного типа	Заполните недостающие по смыслу слова/словосочетания и запишите развернутый ответ: Существует три главных теории квантовой химии, которые составили научный, физический фундамент современной химии: понятие о _____ электрона _____ как распределённого в пространстве и времени заряда и спина углового момента; принцип _____ Паули, организующий электроны по энергетическим уровням и _____, "рассаживающий" электроны по их собственным орбиталям; волновое _____, _____, основное _____ уравнение квантовой теории. Какие модели получены на основании _____ решения уравнения Шредингера?	волновой функции спиновым состояниям уравнение Шредингера На основании решения уравнения Шредингера при различных вариантах (условиях) были получены различные модели и практические решения, применяемые в различных областях физики и химии. Вот несколько наиболее известных моделей: 1. Модель бесконечного потенциального ящика: описывает частицы, которые могут двигаться только внутри ограниченного объема, с жесткими стенками. Она позволяет понять основные принципы квантовой механики, такие как квантование энергии. 2. Модели гармонического и ангармонического	5-8

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			осциллятора: это решения описывают колебания частиц в потенциале гармонического / ангармонического осциллятора, которые являются основой для многих физических систем, включая молекулы и кристаллы. Она включает в себя квантование уровней энергии и явления, связанные с нулевыми колебаниями. 3. Модель водородного атома - основа основ теории строения атома в химии: решение уравнения Шрёдингера для водородного атома описывает распределение электронов вокруг ядра и позволяет вычислить уровни энергии и спектры излучения атома. Это одно из самых известных и успешных решений в квантовой механике. 4. Модель атомов и молекул (полуэмпирическая и неэмпирическая химия): расширенные решения уравнения Шрёдингера позволяют изучать структуры атомов и молекул, а также их химические реакции. Подходы, такие как метод Хартри-Фока и теория функционала плотности, основываются на решениях уравнения Шрёдингера. 5. Теория Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака: эти модели описывают свойства квантовых газов с учетом статистики для бозонов и фермионов, соответственно. Они исходят из уравнения Шрёдингера и помогают	

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			понять явления, такие как суперсостояние и проводимость. 6. Квантовые вычисления: уравнение Шрёдингера также лежит в основе теории квантовых вычислений, где информацию можно обрабатывать с помощью квантовых битов (кубитов), что создает новые перспективы для технологий обработки больших данных.	

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 10. Технологическая карта рейтинговых баллов по дисциплине

№	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий/баллы	Максимальное кол-во баллов	Срок представления
Основной блок				
1.	Выполнение заданий для самоконтроля №1, №2 к лабораторно-вычислительным работам	2/3	6	По расписанию
2.	Выполнение заданий для самоконтроля в moodle.asu-edu.ru к лабораторно-вычислительным работам	2/3	6	По расписанию
3.	Контрольная работа №1	1/10	10	По расписанию
4.	Лабораторно-вычислительная работа за ПК (лаб. №3, №4)	2/5	10	По расписанию
5.	Подготовка презентации	1/2	2	По расписанию
6.	Итоговое тестирование	1/6	6	По расписанию
Промежуточный контроль			40	
Блок бонусов				
7.	Портфолио		10	По расписанию
Дополнительный блок				
8.	Экзамен	50	50	По расписанию

№	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий/баллы	Максимальное кол-во баллов	Срок представления
Всего			50	
ИТОГО			100	

Таблица 11. Система штрафов (для одного занятия)

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

Таблица 12. Шкала перевода рейтинговых баллов в итоговую оценку за семестр по дисциплине

Сумма баллов	Оценка по 4-балльной шкале
90–100	5 (отлично)
85–89	4 (хорошо)
75–84	
70–74	
65–69	
60–64	3 (удовлетворительно)
Ниже 60	2 (неудовлетворительно)

При реализации дисциплины (модуля) в зависимости от уровня подготовленности обучающихся могут быть использованы иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

8.1. Основная литература

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);
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. Электронный вариант: <https://biblio.asu-edu.ru/reader/book/2020092816145836600002063696>;
3. Соловьев М.Е. Компьютерная химия – М.: СОЛОН-Пресс, 2005. – 536 с. – (Библиотека студента);
4. Гавриленкова И.В. Введение в квантовую биофизику: учебное пособие для студентов медицинских вузов – Астрахань: Издательский дом «Астраханский университет», 2015. – 138 с. Электронный вариант: <https://biblio.asu-edu.ru/reader/book/2017111712362400600002063420>;
5. Шагаутдинова, И.Т., Лихтер, А.М., Березин, К.В. Сборник проектных заданий к спецкурсу «Оптические свойства биомолекул»: учебное пособие – Астрахань: Издательский дом «Астраханский университет», 2019. – 98 с. Электронный вариант: <https://biblio.asu-edu.ru/reader/book/2020092311451952200002068392>;
6. 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>

7. 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>

8.2. 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>.

8.3. Интернет-ресурсы, необходимые для освоения дисциплины

1. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» <http://dlib.eastview.com>
Имя пользователя: AstrGU
Пароль: AstrGU
2. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <https://library.asu-edu.ru/catalog/>
3. Электронный каталог «Научные журналы АГУ» <https://journal.asu-edu.ru/>
4. Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек <http://mars.arbicon.ru>
5. Электронная библиотечная система IPRbooks www.iprbookshop.ru
6. Электронно-библиотечная система BOOK.ru <https://book.ru>
7. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги» www.biblio-online.ru, <https://urait.ru/>
8. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех» <https://biblio.asu-edu.ru> Учётная запись образовательного портала АГУ
9. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» www.studentlibrary.ru Регистрация с компьютеров АГУ

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины включает в себя лекционную аудиторию, оснащенную проекционным оборудованием, экраном, ЭВМ с презентационным ПО и компьютерный класс для проведения практических и семинарских работ. В учебном процессе для освоения дисциплины используются следующие технические средства – компьютерное, мультимедийное оборудование для проведения практических занятий.

10. ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) ПРИ ОБУЧЕНИИ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Рабочая программа дисциплины (модуля) при необходимости может быть адаптирована для обучения (в том числе с применением дистанционных образовательных

технологий) лиц с ограниченными возможностями здоровья, инвалидов. Для этого требуется заявление обучающихся, являющихся лицами с ограниченными возможностями здоровья, инвалидами, или их законных представителей и рекомендации психолого-медико-педагогической комиссии. При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья учитываются их индивидуальные психофизические особенности. Обучение инвалидов осуществляется также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида (при наличии).

Для лиц с нарушением слуха возможно предоставление учебной информации в визуальной форме (краткий конспект лекций; тексты заданий, напечатанные увеличенным шрифтом), на аудиторных занятиях допускается присутствие ассистента, а также сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков. Текущий контроль успеваемости осуществляется в письменной форме: обучающийся письменно отвечает на вопросы, письменно выполняет практические задания. Доклад (реферат) также может быть представлен в письменной форме, при этом требования к содержанию остаются теми же, а требования к качеству изложения материала (понятность, качество речи, взаимодействие с аудиторией и т. д.) заменяются на соответствующие требования, предъявляемые к письменным работам (качество оформления текста и списка литературы, грамотность, наличие иллюстрационных материалов и т. д.). Промежуточная аттестация для лиц с нарушениями слуха проводится в письменной форме, при этом используются общие критерии оценивания. При необходимости время подготовки к ответу может быть увеличено.

Для лиц с нарушением зрения допускается аудиальное предоставление информации, а также использование на аудиторных занятиях звукозаписывающих устройств (диктофонов и т. д.). Допускается присутствие на занятиях ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь. Текущий контроль успеваемости осуществляется в устной форме. При проведении промежуточной аттестации для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование по вопросам.

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата, на аудиторных занятиях, а также при проведении процедур текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации могут быть предоставлены необходимые технические средства (персональный компьютер, ноутбук или другой гаджет); допускается присутствие ассистента (ассистентов), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь (занять рабочее место, передвигаться по аудитории, прочитать задание, оформить ответ, общаться с преподавателем).