

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

Должность: врио ректора

Дата подписания: 16.09.2022 15:36:46

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

28 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

## Квантовая механика и квантовая химия

**Направление подготовки**

04.03.01 Химия

**Направленность (профиль)**

Перспективные материалы: синтез и анализ

Для студентов 3 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., Русакова Н.П. \_\_\_\_\_

Тверь, 2021

## **I. Аннотация**

### **1. Цель и задачи дисциплины:**

Квантовая механика – теоретический раздел физики, рассматривающий механику движения микрочастиц (электронов, протонов и т.д.). Она позволяет описать квантовые системы. Квантовая химия – теоретическая основа представлений современной химической науки. *Содержание дисциплины* “Квантовая механика и квантовая химия” определено следующим образом:

- основные постулаты и математический аппарат квантовой механики;
- основные положения квантовой химии;
- неэмпирические и полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул;
- качественная теория реакционной способности

**Цель дисциплины** – познакомить студента с идеями и методами квантовой механики и квантовой химии, составляющих основной теоретический фундамент современной химии.

### **Задачи дисциплины**

- раскрыть основные понятия и постулаты квантовой механики,
- помочь студентам освоить математический аппарат квантовой механики
- сформировать у студентов умение применять математический аппарат квантовой механики для решения конкретных квантовомеханических задач
- показать глубину взаимосвязи квантовой механики и квантовой химии
- выработать умение применения знаний о неэмпирических и полуэмпирических методах при работе с программным обеспечением дисциплины и т.д.

### **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия» входит в обязательную часть Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Данная дисциплина тесно связана с дисциплиной «Строение вещества», «Кристаллохимией», «Стереохимией» и др.

### **3. Объем дисциплины: 4 зачетные единицы, 144 академических часов, в том числе:**

**контактная аудиторная работа;** лекции - 18 часов, практические занятия –36 часов;

**контактная внеаудиторная работа:** контроль самостоятельной работы – 20 часов;

**самостоятельная работа:** 43 час, контроль - 27 часов.

**4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
<p>ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники</p>	<p>ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности</p> <p>ОПК-3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности</p>
<p>ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач</p>	<p>ОПК-4.1 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности</p>
<p>ОПК-5 Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p>ОПК-5.1 Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля</p>
<p>ОПК-6 Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе</p>	<p>ОПК-6.1 Представляет результаты работы в виде отчета по стандартной форме на русском языке</p> <p>ОПК-6.4 Готовит презентацию по теме работы и представляет ее на русском и английском языках</p>

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр:**  
экзамен в 6-м семестре.

## 6. Язык преподавания русский.

### II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

#### 1. Для студентов очной формы обучения

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)			Самостоятельная работа (час.)	Контроль
		Лекции	Практические занятия	Контроль самостоятельной работы		
1 Введение	1	1	0	0	0	0
2 Математический аппарат квантовой механики	10	2	4	2	2	0
3 Основные постулаты квантовой механики	12	2	4	2	2	2
4 Угловые моменты (моменты импульса)	12	2	4	2	2	2
5 Квантовая механика простых систем	16	3	4	2	4	3
6 Приближённые методы решения задач	30	2	8	4	10	6
7 Общие вопросы квантовой химии	17	2	4	2	7	2
8 Квантовая теория химической связи	24	2	4	4	8	6
9 Квантовая теория химических реакций	22	2	4	2	8	6
<b>Итого</b>	<b>144</b>	<b>18</b>	<b>36</b>	<b>20</b>	<b>43</b>	<b>27</b>

### III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
1. Введение	• Лекция	• традиционные (фронтальная лекция) • цифровые (показ презентаций), • групповая работа
2. Математический аппарат квантовой механики	• Лекция • Практические занятия	• традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • цифровые (показ презентаций, выполнение практических работ), • групповая работа

3. Основные постулаты квантовой механики	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Лекции</li> <li>• Практические занятия</li> <li>• Контроль самостоятельной работы</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений),</li> <li>• цифровые (показ презентаций, выполнение практических работ),</li> <li>• групповая работа</li> </ul>
4. Угловые моменты (моменты импульса)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Лекции</li> <li>• Практические занятия</li> <li>• Контроль самостоятельной работы</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений),</li> <li>• цифровые (показ презентаций, выполнение практических работ),</li> <li>• групповая работа</li> <li>• модульная работа</li> </ul>
5. Квантовая механика простых систем	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Лекция</li> <li>• Практические занятия</li> <li>• Контроль самостоятельной работы</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений),</li> <li>• цифровые (показ презентаций, выполнение практических работ),</li> <li>• групповая работа</li> </ul>
6. Приближённые методы решения задач	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Лекции</li> <li>• Практические занятия</li> <li>• Контроль самостоятельной работы</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений),</li> <li>• цифровые (показ презентаций, выполнение практических работ),</li> <li>• групповая работа</li> </ul>
7. Общие вопросы квантовой химии	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Лекции</li> <li>• Практические занятия</li> <li>• Контроль самостоятельной работы</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений),</li> <li>• цифровые (показ презентаций, выполнение практических работ),</li> <li>• групповая работа</li> </ul>
8. Квантовая теория химической связи	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Лекции</li> <li>• Практические занятия</li> <li>• Контроль самостоятельной работы</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений),</li> <li>• цифровые (показ презентаций, выполнение практических работ),</li> <li>• групповая работа</li> </ul>
9. Квантовая теория химических реакций	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Лекции</li> <li>• Практические занятия</li> <li>• Контроль самостоятельной работы</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений),</li> <li>• цифровые (показ презентаций, выполнение практических работ),</li> <li>• групповая работа</li> <li>• модульная работа</li> </ul>

#### IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

№	Результат (индикатор)	Вид/способ	Критерии оценивания
<b>МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ АТТЕСТАЦИИ</b>			
1	ОПК-3.1;	вид:	20 баллов.

	ОПК-3.2; ОПК-4.1; ОПК-5.1; ОПК-6.1; ОПК-6.4;	практические работы № 1 - № 9 <b>способ:</b> на компьютере <b>результаты:</b> оформлены в виде проекта	9 работ (по 2 балла каждая) Оформленный проект- 2 балла
2		<b>вид:</b> модульная работа № 1 модульная работа № 2 <b>способ:</b> традиционный <b>результаты:</b> оформленные по заданию бумажные бланки с решениями	10 баллов 10 баллов
3		<b>вид:</b> выполнение самостоятельной работы <b>способ:</b> на компьютере <b>результаты:</b> отчет презентация на русском и английском языках,	20 баллов <b>Критерии оценки:</b> <i>20 баллов</i> – задание выполнено на двух языках, оформлено в соответствии с требованиями; <i>10 баллов</i> – задание частично оформлено в соответствии с требованиями, выполнено на двух языках; <i>5 баллов</i> – задание выполнено на одном языке, оформлено не в соответствии с требованиями; <i>0 баллов</i> – задание не представлено;
4		Посещаемость	0 баллов
		<b>Итого:</b>	<b>60 баллов</b>

#### МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

*Своевременное выполнение практических, модульных работ, посещение занятий и работа на них обучающегося (по итогам текущего контроля успеваемости) не позволяют набрать студенту бакалавриата необходимое количество баллов для положительной оценки. Для получения порогового количества баллов студенту необходимо так же выполнение самостоятельной работы в полном объеме. В противном случае результаты освоения индикаторов считаются неудовлетворительными и невыполненные элементы текущего контроля успеваемости выносятся на экзамен.*

#### **Шкала оценивания выполнения индикаторов:**

Индикатор считается выполненным, если либо ко времени промежуточной аттестации обучающийся набрал как минимум пороговое количество баллов в результате текущего контроля за те виды активности (самостоятельная, модульные и практические работы), которые отвечают за данный индикатор.

#### **Шкала и критерии выставления оценок за дисциплину:**

Шкала и критерии выставления оценок описаны в локальной нормативной документации Тверского государственного университета (Положение о рейтинговой системе обучения студентов ТвГУ). Положительная оценка может быть выставлена только в том случае, если выполнены все индикаторы.

## V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 1) Рекомендуемая литература

#### ***а) Основная литература:***

1. Ефремов, Ю.С. Квантовая механика / Ю.С. Ефремов. – Москва; Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 457 с.: ил. – Режим доступа: по подписке. –  
URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273446>
2. Барановский В. И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. Пособие для студ. высш. учеб.заведений / В. И. Барановский. - М.: Издательский центр «Академия», 2008. - 384 с Режим доступа:  
<http://www.kinetics.nsc.ru/chichinin/books/spectroscopy/baranovskii08.pdf>

#### ***б) Дополнительная литература:***

1. Байков Ю. А. Квантовая механика. Учебное пособие. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. - 294 с. – Электронный ресурс. – Режим доступа:  
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=214306>
2. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул.: учебное пособие / Майер И., пер. с англ. 3-е издание — Москва: Лаборатория знаний, 2017. — 385 с. — ISBN 978-5-00101-501-7.  
URL: <https://book.ru/book/923084>
3. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов.: учебное пособие / Цирельсон В.Г. 4-е издание — М: Лаборатория знаний, 2017. — 521 с. — ISBN 978-5-00101-502-4.  
URL: <https://book.ru/book/923090>
4. Иродов, И.Е. Квантовая физика. Основные законы: учебное пособие / Иродов И.Е. 7-е издание — Москва: Лаборатория знаний, 2017. — 259 с. — ISBN 978-5-00101-492-8.  
URL: <https://book.ru/book/923061>
5. Иродов, И.Е. Задачи по квантовой физике.: учебное пособие / Иродов И.Е. 5-е издание — М: Лаборатория знаний, 2015. — 220 с. — ISBN 978-5-9963-2958-8.  
URL: <https://book.ru/book/923957>
6. Соболев, С.В. Основы нерелятивистской квантовой механики / С.В. Соболев. – М: Физматлит, 2017. – 143 с.: граф. – Режим доступа: по подписке. –  
URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=485503>
7. Ведринский Р.В. Квантовая механика. Ростов-на-Дону: Южный федеральный университет, 2009. -384с.  
Режим доступа: <http://www.phys.sfedu.ru/web/teor/Quantum1.pdf>
8. де Бройль Избранные научные труды. Т. 1. Становление квантовой физики. Работы 1921 – 1934 годов / Луи Бройль де. — М.: Логос, 2010. — 556 с. — ISBN 978-5-98704-505-3. — Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS:  
URL: <http://www.iprbookshop.ru/9061.html>
9. Толмачёв, В. В. Квазиклассическая и квантовая теория атома водорода / В. В. Толмачёв, Ф. В. Скрипник. — Москва, Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, Ижевский институт компьютерных исследований, 2008. — 132 с. — ISBN 978-5-93972-642-9. — Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS:  
[сайт].URL: <http://www.iprbookshop.ru/16538.html>
10. Балашов, В. В. Курс квантовой механики / В. В. Балашов, В. К. Долинов. — Москва, Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2001. — 336 с. — ISBN 5-93972-077-3.  
URL: <http://www.iprbookshop.ru/16546.html>
11. Цышевский, Р.В. Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций: учебно-методическое пособие / Р.В. Цышевский, Г.Г. Гарифзянова, Г.М. Храпковский. — Казань: КНИТУ, 2012. — 88 с. — ISBN 978-5-7882-1301-9. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS :



<http://www.iprbookshop.ru/62178.html>

12. Норанович, Д. А. Основы квантово-механических представлений о строении атома : учебное пособие / Д. А. Норанович. — Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. — 100 с. — ISBN 978-5-9275-0852-5. — Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS: [сайт]. URL: <http://www.iprbookshop.ru/47053.html>

## 2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение:

- Microsoft Office профессиональный плюс 2013
- Microsoft Windows 10 Enterprise
- HyperChem

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Google Chrome
- ISIS Draw 2.4 Standalone
- MarvinSketch 5.2.4

## 3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- ЭБС «ZNANIUM.COM» [www.znanium.com](http://www.znanium.com);
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <https://biblioclub.ru/>;
- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com>

## 4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

- Электронная образовательная среда ТвГУ <http://lms.tversu.ru>
- Научная библиотека ТвГУ <http://library.tversu.ru>
- Сайт о химии <http://www.xumuk.ru/>
- Сайт химического факультета МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>

## VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

### 1. Учебная программа

#### I. ВВЕДЕНИЕ

Предмет квантовой механики. Квантовая механика и квантовая химия. Основные этапы развития квантовой теории. Сложная структура атома (экспериментальные доказательства). Квантовая теория света Планка – Эйнштейна. Ядерная модель атома Резерфорда. Теория Бора (основные постулаты). Квантовые числа. Принцип Паули. Правило Хунда. Соотношение де Бройля. Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновая механика Шредингера и матричная механика Гейзенберга (эквивалентность форм). Современное состояние.



## **II. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ**

Понятие оператора. Линейные и самосопряженные (эрмитовы) операторы. Собственные функции и собственные значения операторов. Матричное представление.

## **III. ОСНОВНЫЕ ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ**

Волновая функция как функция состояния системы; ее физический смысл. Динамические переменные и операторы. Измеряемые значения физических величин как собственные значения операторов, представляющих данную величину. Временное и стационарное уравнение Шредингера. Волновая функция системы частиц (бозонов и фермионов). Принцип тождественности частиц.

## **IV. УГЛОВЫЕ МОМЕНТЫ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ**

Угловые или механические моменты частиц: орбитальный, собственный и полный. Перестановочные соотношения. Квантование момента импульса. Собственные значения и собственные функции. Сложение моментов. Векторная модель.

## **V. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ПРОСТЫХ СИСТЕМ**

Частица в потенциальном ящике. Гармонический осциллятор. Жесткий ротатор. Задача об атоме водорода. Энергия атома. Радиальные и угловые волновые функции. Квантовые числа. Атомные орбитали (АО).

## **VI. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ**

Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие и при наличии вырождения. Вариационный принцип в квантовой механике и вариационный метод.

## **VII. ОБЩИЕ ВОПРОСЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

Молекулярная модель. Координаты. Уравнение Шредингера для молекулярной системы. Разделение переменных. Адиабатическое приближение (приближение Борна-Оппенгеймера). Электронное уравнение Шредингера и уравнение для ядерных движений. Энергетические состояния молекул. Вероятности конфигураций ядер и электронов.

Одноэлектронное приближение. Орбитали. Теории валентных связей (ВС) и молекулярных орбиталей (МО).

Самосогласованное поле (ССП). Метод Хартри-Фока (ХФ): ограниченный (ОХФ) и неограниченный (НХФ). Учет электронной корреляции. Методы конфигурационного взаимодействия (КВ) и многоконфигурационного самосогласованного поля (МК СП). Теория возмущений Меллера-Плессета (МП) 2-го и более высоких порядков.

Приближение МО ЛКАО. Уравнения Хартри - Фока - Рутаана. Орбитали слейтеровского типа (ОСТ). Гауссовы функции (ГФ). Базисные наборы.

Неэмпирические расчеты (*ab initio*). Методы МО ЛКАО СП, МО ЛКАО СП КВ,...

Полуэмпирические расчеты. Простой метод Хюккеля (МОХ), расширенный метод Хюккеля (РМХ), метод Паризера - Парра - Попла (ППП).

Приближение нулевого дифференциального перекрывания (НДП). Методы ППДП/1, ППДП/2, ППДП/С; ЧПДП, МЧПДП/1, МЧПДП/2, МЧПДП/3, ЗЧПДП/1, ЗЧПДП/С. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием (ПДДП, МПДП). Методы AM1 (Аустинская модель-1), PM3 и т.д.

Программные комплексы GAUSSIAN (GAUSSIAN-85, GAUSSIAN-98, GAUSSIAN-03,...), GAMESS (США, Англия, Россия – МГУ), HyperChem (Student HyperChem, HyperChem Professional Release), MOPAC и др.

## **VIII. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ**

Квантовая теория химической связи и межмолекулярных взаимодействий, типы химической связи. Затруднения классической теории и их решение в объединённом методе. Теоремы, используемые при описании хим. связи а) силовым методом: теорема Эренфеста и теорема Гельмана-Фейнмана, б) энергетическим – теорема вириала.

## **IX. КВАНТОВАЯ ХИМИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ**

Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности в элементарном акте химической реакции. Переходное состояние. Корреляционные правила Вудворда - Хофмана. Теория граничных орбиталей Фукуи

### **2. Темы, объекты и методические указания по подготовке к практическим занятиям**

Планы практических занятий и методические рекомендации по подготовке к ним разработаны в соответствии с программой дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» и предназначены для проведения практических занятий и для самостоятельной подготовки студентов.

Практические занятия по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» являются одной из важнейших форм обучения студентов и проводятся с целью углубления и закрепления знаний, привития навыков поиска, обобщения и изложения материала. Развитие темы практического занятия регламентируется (количество академических часов) преподавателем.

#### **Темы практических занятий.**

1. Методы отображения молекул в пространстве. Z-матрица и декартовы координаты. Способы их решения в квантовой химии
2. Квантово-химические расчетные программы и комплексы. Возможности и недостатки.
3. Расчетные базисы. Классификации базисов. Основы построения базисов различных базисов. Расширенные наборы Поппла.
4. Методы вычисления функционала, используемые в DFT.
5. Радиальные и угловые волновые функции в приближении Борна-Оппенгеймера. Разделение переменных.
6. Стационарные состояния молекулярной системы Рассчитываемые методом МО ЛКАО.

7. Распределение электронной плотности молекул в терминологии QТАИМ.
8. Определение внутримолекулярных эффектов через электронные свойства молекул.
9. Определение свойств химических связей через топологию электронной плотности в рамках «квантовой теории атомов в молекулах»

#### **Примеры объектов исследования для практических занятий**

1.  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-NH}_2$ ;
2.  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHCl-CH}_3$ ;
3.  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ ;
4.  $\text{CH}_3\text{-CH(OH)-CH}_3$ ;
5.  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C(O)H}$ ;
6.  $\text{C(OH)}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ ;
7.  $\text{CH}_3\text{-CH(OH)-CH(OH)-CH}_3$ ;
8.  $\text{CH}_3\text{-CH(NH}_2\text{)-CH}_2\text{-CH}_3$  и др.

Студент бакалавриата может выбрать другой объект более близкий к своей научной работе после согласования с преподавателем дисциплины.

### **3. Задания и контроль самостоятельной работы**

Перед каждым практическим занятием необходима самостоятельная работа по подготовке к его выполнению по индивидуальным темам. Для этого обучающемуся предлагаются темы для самостоятельной проработки. Данные, которые будут получены в результате выполнения тем, будут использованы в практических работах. Все практические работы, не выполненные в аудиторных часах занятий, так же остаются в качестве домашнего задания. Срок выполнения – две недели, после чего максимальное количество баллов за соответствующее задание снижается в два раза.

Самостоятельная работа по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» проводится с целью углубления и закрепления полученных в ходе лекционных занятий знаний и приобретение навыков пользования рекомендованной литературой, навыков научного исследования. Самостоятельная работа начинается с работы над лекционным материалом. Она включает конспектирование лекций и последующую работу над ними. При конспектировании лекции рекомендуется на каждой странице оставлять поля для последующих записей в дополнение к конспекту. При работе над текстом лекции студенту следует обратить особое внимание на проблемные вопросы, поставленные преподавателем при чтении лекции, а так же на его задание и рекомендации.

#### ***Перечень вопросов для самостоятельной работы над лекцией:***

1. Дайте определение оператора;

2. Перечислите ограничения, накладываемые на операторы физических величин в квантовой механике;
3. Перечислите основные операторы квантовой механики;
4. Выражение для коммутатора двух операторов;
5. Охарактеризуйте тензор;
6. Почему оператор задается в матричной форме?
7. Как можно задать координаты вектора?
8. Физический смысл соотношения неопределённостей;
9. Физический смысл Планковской константы;
10. Что задает волновая функция?
11. Какие условия накладываются на волновую функцию, являющуюся областью определения оператора Гамильтона?
12. Почему в кв. химии используется стационарное уравнение Шредингера?
13. Что представляет собой волновая функция системы?
14. Какие условия накладываются на волновую функцию в квантовой механике?
15. Почему в кв. химии используется стационарное уравнение Шредингера?
16. Формулировка принципа суперпозиции квантовых состояний;
17. Формулировка принципа тождественности
18. Зачем необходимо среднее значение наблюдаемой величины?
19. Что представляет собой механический момент атома?
20. Что входит в магнитный момент атома?
21. Что входит в орбитальный момент атома?
22. Что такое спин электрона?
23. Кинетическая энергия системы;
24. Через какую физическую величину можно связать инерцию с импульсом в квантовой механике?
25. Тензор момента инерции в системе центра масс;
26. Тензор момента инерции в системе главных осей;
27. Квантово-механические модели движения частицы;
28. Особенность туннельного эффекта;
29. Формула минимального значения энергии на нулевом уровне;
30. Чему равен оператор гамильтона для частицы в бесконечном потенциальном ящике? формула
31. Чему равна вероятность обнаружения частицы в бесконечном потенциальном ящике с  $n=3$ ? формула
32. Для чего в квантовой механике атом водорода рассматривается в системе центра масс?
33. Оператор гамильтона для атома водорода.
34. Почему в волновой функции выделяют угловые и радиальную части?
35. Какая модель описывает движение электрона в атоме водорода в трёхмерном пространстве?

36. Какие элементы движения электрона в атоме водорода в трёхмерном пространстве характеризуют квантовые числа  $n, m, l$ ?
37. Для чего нужно приближение Борна-Оппенгеймера?
38. Как меняется вид волновой функции в этом приближении?
39. Что происходит с потенциальной энергией электрон-ядерных взаимодействий в приближении Борна-Оппенгеймера?
40. От чего зависит полная энергия системы в приближении Борна-Оппенгеймера?
41. Что представляет собой поверхность потенциальной энергии?
42. Для чего нужно приближение Хартри?
43. Напишите уравнение Хартри.
44. Какие недостатки у метода Хартри?
45. Напишите уравнение Хартри-Фока.
46. Как описываются атомные электронные оболочки в разных вариантах метода Хартри-Фока?
47. Что представляет собой приближение МО ЛКАО?
48. Перечислите квантовомеханические программы, работающие с приближением МО ЛКАО;
49. Какие уравнения использует метод МО ЛКАО и в чём их физическое различие?  
И т.д.

***Примеры тем для индивидуальной работы:***

1. Постулаты Бора. Расчеты радиусов боровских орбит, энергий отдельных состояний, длин волн спектральных переходов
2. Линейные и самосопряженные операторы (в гильбертовом пространстве). Собственные функции и собственные значения. Матричное представление операторов.
3. Основные операторы квантовой механики: координата, импульс, момент импульса (перестановочные соотношения). Гамильтониан.
4. Основные постулаты квантовой механики.
5. Моменты импульса.
6. Энергия атома. Радиальные и угловые волновые функции. Квантовые числа. Атомные орбитали (АО). Электронные конфигурации и термы атомов. Построение Периодической системы элементов Д.И. Менделеева.
7. Уравнение Шредингера для стационарных состояний молекулярной системы. Разделение переменных.
8. Расчетные схемы квантовой химии в приближении МО ЛКАО. Неэмпирические и полуэмпирические расчеты. Базисные наборы ОСТ-3ГФ, 6-31G\*, 6-31G\*\* и т.д. Методы HF/3-21G, HF/4-31G, HF/6-31G\*, MP2/6-31G\*, MP3/6-31G\* и т.п. Квантовомеханические программы.
9. Электронное строение молекул и молекулярных ионов  $C_5H_5^-$  (циклопентадиенил-анион),  $C_6H_6$  (бензол),  $C_7H_7^+$  (тропилий-катион),  $C_8H_8$  - на языке ВС. Истолкование ароматичности.

#### 4. Распределение тем учебной дисциплины по модулям

##### Модуль I.

Основные этапы развития квантовой теории. Структура атома (модель атома Резерфорда, Бора, Шредингера и Томсона). Принцип Паули. Правило Хунда. Соотношение де Бройля. Принцип неопределенности Гейзенберга. Понятие оператора. Линейные и самосопряженные (эрмитовы) операторы. Собственные функции и собственные значения операторов. Волновая функция как функция состояния системы; ее физический смысл. Динамические переменные и операторы. Измеряемые значения физических величин как собственные значения операторов, представляющих данную величину. Временное и стационарное уравнение Шредингера. Принцип тождественности частиц. Угловые или механические моменты частиц: орбитальный, собственный и полный. Квантование моментов.

##### Модуль II.

Частица в потенциальном ящике. Гармонический осциллятор. Жесткий ротатор. Задача об атоме водорода. Энергия атома. Радиальные и угловые волновые функции. Квантовые числа. Атомные орбитали (АО). Теория возмущений. Вариационный принцип. Молекулярная модель. Координаты. Уравнение Шредингера для молекулярной системы. Разделение переменных. Адиабатическое приближение (приближение Борна-Оппенгеймера). Электронное уравнение Шредингера и уравнение для ядерных движений. Самосогласованное поле (ССП). Метод Хартри-Фока (ХФ): ограниченный (ОХФ) и неограниченный (НХФ). Учет электронной корреляции. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Хартри - Фока - Рутаана. Орбитали слейтеровского типа (ОСТ). Гауссовы функции (ГФ). Базисные наборы. Неэмпирические расчеты (*ab initio*). Полуэмпирические расчеты. Программные комплексы GAUSSIAN (GAUSSIAN-85, GAUSSIAN-98, GAUSSIAN-03,...), GAMESS (США, Англия, Россия – МГУ), HyperChem (Student HyperChem, HyperChem Professional Release), МОРАС и др. Квантовая теория химической связи и межмолекулярных взаимодействий, типы химической связи. Теоремы Эренфеста, Гельмана-Фейнмана, вириала. Потенциальная поверхность химической реакции. Переходное состояние. Корреляционные правила Вудворда - Хофмана. Теория граничных орбиталей Фукуи

#### Перечень вопросов и заданий для подготовки к рубежному контролю

##### Вопросы к тесту № 1:

- 1) Модель атома Резерфорда
- 2) Модель атома Бора
- 3) Модель атома Томсона
- 4) Модель атома Шредингера



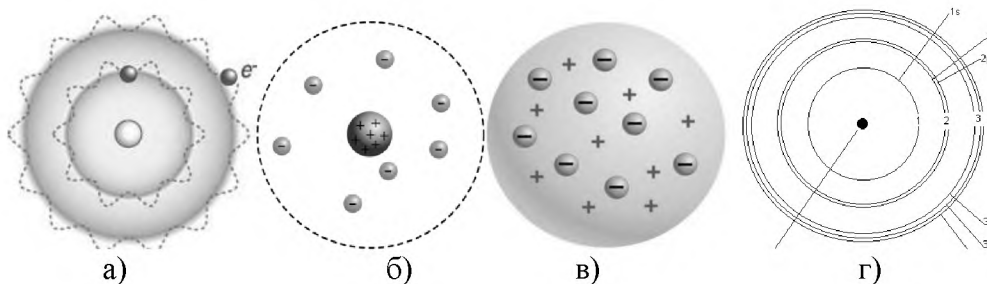
- 5) Определение понятий: квантовая механика
- 6) Определение понятий: квантовая химия
- 7) Определение понятий: орбиталь по Шредингеру
- 8) Определение понятий: орбиталь по Бору
- 9) Определение понятий: изотопы
- 10) Определение понятий: радиоактивность
- 11) Определение понятий: квантовая теория атома
- 12) Определение понятий: стационарное состояние электрона
- 13) Определение понятий: оператор в квантовой механике
- 14) Определение понятий: волновая функция в квантовой механике
- 15) Определение понятий: уравнение Шредингера в квантовой химии
- 16) Определение понятий: область определения оператора
- 17) Определение понятий: наблюдаемая величина
- 18) Определение понятий: квантовое состояние
- 19) Определение понятий: комплексное сепарабельное гильбертово пространство
- 20) Определение понятий: собственный вектор оператора кв. мех
- 21) Определение понятий: матрица.
- 22) Определение понятий: тензор
- 23) Определение понятий: принцип неопределённости Гейзенберга
- 24) Определение понятий: постоянной Планка
- 25) Определение понятий: постулат
- 26) Определение понятий: момент импульса, момент инерции
- 27) Определение понятий: боровский радиус атома
- 28) Определение понятий: скорость движения электрона в атоме
- 29) Определение понятий: главные оси тензора инерции молекулы, главные моменты инерции молекулы
- 30) Свойства операторов: сумма
- 31) Свойства операторов: произведение операторов, действие произведения операторов на волновую функцию
- 32) Свойства операторов: коммутация операторов
- 33) Свойства операторов квантовой механики: эрмитовость и линейность
- 34) Операторы квантовой механики: векторные операторы: набла и лапласа
- 35) Операторы квантовой механики: оператор кинетической энергии, оператор импульса, оператор координаты
- 36) Коммутация двух операторов: импульса и координаты
- 37) Коммутация двух операторов координат
- 38) Коммутация двух операторов импульса
- 39) Типы множеств собственных значений оператора
- 40) Типы матриц. Элементы матриц
- 41) Тензор момента инерции
- 42) Системы координат: лабораторная, система центра масс, вращающаяся
- 43) Способы задания любого вектора в двумерном пространстве. Типы координат для задания любого вектора в двумерном пространстве и их матричная форма

- 44) Принцип неопределённостей Гейзенберга – физический смысл.  
Пример из квантовой механики
- 45) Постоянная Планка – физический смысл, соотношение с приведённой постоянной Планка.
- 46) Постулат № 1
- 47) Постулат № 2
- 48) Постулат № 3
- 49) Постулат № 4
- 50) Постулат № 5
- 51) Постулат № 6
- 52) Постулат № 7
- 53) Орбитальный момент атома. Квантование момента импульса
- 54) Магнитный момент атома. Квантование магнитного момента
- 55) Магнитный момент электрона. Квантование спинового момента
- 56) Связь импульса и момента инерции в квантовой механике
- 57) Матрица тензора момента инерции
- 58) Кинетическая энергия вращения в квантовой механике.
- 59) Эллипсоид энергии
- 60) Тензор момента инерции в главных осях ЭЭ

### Примеры построения вариантов заданий

Задание 1. Модель атома Резерфорда

Выберите правильный вариант:



Задание 2. Какую систему отсчёта используют в квантовой химии для описания движения квантовой системы (молекулы)?

Выберите правильный вариант:

- Лабораторная система координат
- Система центра масс невращающаяся
- Система центра масс вращающаяся
- Многомерная система отсчёта

Задание 3. Приближение Борна-Оппенгеймера позволяет:

- найти точную волновую функцию системы
- найти точную функцию электронной плотности
- выделить в волновой функции угловую и радиальную составляющую

4. выразить функцию электронной плотности через волновую функцию квантовой системы

Задание 4. Движение электрона в квантовой механике наиболее точно описывает модель:

1. частица в потенциальном ящике с бесконечно высокими прямыми стенками
2. частица в потенциальной яме с расширяющимися стенками
3. квантовый гармонический осциллятор
4. нежёсткий сферический ротатор

Задание 5. Основные свойства операторов квантовой механики:

Выберите правильный ответ

1. Непрерывность
- 1 Ортогональность
- 2 Симметричность
- 3 Линейность
- 4 Нормированность
- 5 Эрмитовость

Задание 6. Основные ограничения, накладываемые на волновую функцию в квантовой механике:

Выберите правильный ответ

1. Непрерывность
2. Ортогональность
3. Симметричность
4. Линейность
5. Нормированность
6. Эрмитовость

Задание 7. Какой вид волновых функций использует метод DFT?

Выбрать верный вариант:

1.  $\rho$
2.  $\psi$
3.  $\sigma$
4.  $\sin$

Задание 8. Чтобы найти физическое свойство квантовой системы надо:

1. задать оператор этого свойства
2. измерить это свойство с помощью рентгенструктурного анализа
3. получить волновую функцию квантовой системы
4. решить уравнение Шредингера

Задание 9. Оператор потенциальной энергии одноэлектронного гамильтониана равен:

Выберите правильный ответ:

a)  $-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2$       b)  $\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r}$       c)  $\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\cdot\frac{Ze^2}{r}$       d)  $e^2\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{\varphi_j^2}{4\pi\epsilon_0r_{ij}}\right]dv_j$

1. Задание 10. Какой командой задаётся приближение для вычисления радикальной структуры в программе HyperChem?

Выбрать верный вариант:

- a) RMS
- b) MP2
- c) UNF
- d) SCF



## 5. Вопросы к экзамену

1. Адиабатический электронный потенциал, его физический смысл. ППЭ и её свойства, стационарные точки и конформации молекул.
2. Что называется и как вводится в квантовую систему эллипсоид энергии. Тензор момента инерции в главных осях эллипсоида энергии, главные оси тензора инерции молекулы, главные моменты инерции квантовой системы
3. Понятие химической связи в квантовой химии
4. Типы движения квантовой частицы: одномерный потенциальный ящик, волновая функция частицы, оператор Гамильтона
5. Тензор в квантовой механике, типы координат для определения в двумерном пространстве любого вектора, собственный вектор оператора в квантовой механике. Тензор момента инерции, что представляют собой элементы его матрицы
6. Квантовая теория атомов в молекулах. Основные элементы
7. Дайте описание и математическое отображение орбитального момента атома, магнитного момента атома, магнитного момента электрона. Квантование всех моментов.
8. Потенциальный барьер, изменение волновой функции в зависимости от величины барьера, туннелирование, формулировка, вероятности отражения и прохождения частицы.
9. Одноэлектронное приближение Хартри физический смысл, математическое отображение, недостатки
10. Принцип Паули и правило Хунда для квантовой системы, показать на примере атома серы-S (3 период, VI группа) и молекулы азота –N<sub>2</sub> (2 период, V-группа)
11. Атом водорода в квантовой механике
12. Постулат квантовой механики №4, №5
13. Кинетическая энергия квантовой системы, векторные операторы и их физический смысл, кинетическая энергия атома водорода.
14. Постулат квантовой механики № 6
15. Волновая функция для одноэлектронного приближения, приближения Хартри-Фока, приближения МО ЛКАО – отличия, преимущества и недостатки каждой из них.
16. Кинетическая энергия вращения в квантовой механике, её связь с моментами инерции и импульса.
17. Метод ССП
18. Постулат квантовой механики №3
19. Что называется и как вводится в квантовую систему эллипсоид энергии.
20. Тензор момента инерции в главных осях эллипсоида энергии, главные оси тензора инерции молекулы, главные моменты инерции квантовой системы
21. Кулоновское взаимодействие в квантовых системах. Методы корреляции кулоновских сил квантовой системы
22. Собственные функции операторов квантовой механики, их свойства.
23. Планковская константа, физический смысл, соотношение с приведённой постоянной Планка, скорость движения электрона в атоме
24. Волновая функция, физический смысл, Момент инерции в квантовой механике – тензор второго ранга. Чем определяется ранг тензора?
25. Операторы квантовой механики, их свойства и область определения.



26. Коммутация операторов. Примеры и решения некоммутирующих и коммутирующих операторов квантовой механики.
27. Квантовая механика и квантовая химия. Дать определения и показать их связь через уравнение Шредингера и волновую функцию
28. Постулат квантовой механики №7
29. Особенности различных систем координат в квантовой механике. Опишите систему координат, используемую для многоэлектронных атомов и систему координат, используемую для молекул.
30. Приближение Борна-Оппенгеймера, физический смысл, математическое отображение, недостатки
31. Постулат квантовой механики №1
32. Кинетическая энергия квантовой системы, векторные операторы и их физический смысл, кинетическая энергия атома водорода.
33. Типы движения квантовой частицы: квантовый гармонический осциллятор, волновая функция
34. Основные приближения квантовой химии №2
35. Эволюция представлений о строении атома в опытах от Бора до Шредингера
36. Условие ортонормированности волновой функции в квантовой механике, условие нормировки волновой функции для квантовой модели движения: сферический ротатор.
37. Основные приближения квантовой химии №1
38. Дайте описание и математическое отображение орбитального момента атома, магнитного момента атома, магнитного момента электрона. Квантование всех моментов.
39. Уравнение Хартри-Фока-Рутаана и его упрощение для метода МО ЛКАО
40. Постулат квантовой механики №2
41. Общий вид основного уравнения квантовой механики, общий вид основного уравнения квантовой химии, основное уравнение для атома водорода.
42. Метод Хартри-Фока, физический смысл, математическое отображение, подразделение на виды в зависимости от объекта исследования.
43. Матрица, типы матриц, элементы матриц
44. Становление квантовой теории атома от неделимости к системе квантовых частиц.
45. Одноэлектронное приближение Хартри физический смысл, математическое отображение, недостатки
46. Квантово-химические расчётные программы и методы: сходство различие применимость
47. Тензор в квантовой механике, типы координат для определения в двумерном пространстве любого вектора, собственный вектор оператора в квантовой механике. Тензор момента инерции, что представляют собой элементы его матрицы?
48. Типы движения квантовой частицы: ротатор. Квантовые числа в описании данного типа движения.
49. Базис. Базисные наборы
50. Принцип неопределённостей Гейзенберга, его физический смысл, математическое отображение
51. Детерминант Слейтера. Объяснить учёт антисимметричности волновых функций в матричной форме оператора на примере атома углерода (2 период, IV группа)
52. Основные приближения квантовой химии №3

53. Описание молекулы в положениях квантовой химии и постулатах квантовой механики
54. Приближение Мо ЛКАО, физический смысл, математическое отображение, недостатки

## **6. Указания для обучающихся**

Организуя свою учебную работу студенты должны, во-первых, выявить рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса, практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Во-вторых, ознакомиться с указанным в методическом материале по дисциплине перечнем учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнению самостоятельной работы, а также с методическими материалами на бумажных и/или электронных носителях, предоставляемых студентам преподавателем во время занятий.

Самостоятельная работа обучающихся, предусмотренная учебным планом, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

### **Подготовка отчета по объекту самостоятельной работы**

Оформление отчета происходит на русском языке. Каждая тема самостоятельной работы раскрыта и описана на отдельном листке формата А4, со всеми полями 2 см. шрифтом TNR, кегль 12, с одиночным интервалом между строками. Вверху, справа фамилия, имя и группа обучающегося.

### **Подготовка презентации по объекту самостоятельной работы**

*Структура презентации.*

Структура презентации должна соответствовать структуре разрабатываемой темы:

1. Титульный слайд (1 слайд).

Первый лист – это титульный лист, на котором обязательно должны быть представлены: название темы; план презентации (вопросы, раскрывающие тему)

2. Слайды, раскрывающие тему (9 - 10 слайдов).

Следующими слайдами должно быть содержание, где представлены основные вопросы темы. Желательно, чтобы из содержания по гиперссылке можно перейти на необходимую страницу и вернуться вновь на содержание.

3. Финальный слайд (1 слайд).

На последнем слайде должны быть выводы о проделанной работе, так же фамилия, имя, отчество студента, группа; должность, фамилия, имя, отчество преподавателя

Рекомендуемое общее количество слайдов – 10 - 12

### **Этапы подготовки презентации**

Создание презентации состоит из следующих этапов:

***I. Планирование презентации*** – это многошаговая процедура, включающая определение целей, изучение темы, формирование структуры и логики подачи материала. Планирование презентации включает в себя два основных этапа:

#### 1 – Формирование материала на русском языке

Он включает в себя самую кропотливую работу с материалом и подразделяется на:

- Определение целей.
- Сбор информации о материале.
- Определение основной идеи презентации.
- Подбор дополнительной информации.
- Планирование презентации.
- Подготовка заключения.

#### 2 – Формирование презентации на английском языке

На данном этапе требуется внимательная работа по переводу материалов на английский язык

***II. Разработка презентации*** – методологические особенности подготовки слайдов презентации, включая вертикальную и горизонтальную логику, содержание и соотношение текстовой и графической информации.

***III. Репетиция презентации*** – это проверка и отладка созданной презентации. Она проводится на русском языке

#### *Требования к оформлению презентации*

Оформление презентации происходит на английском языке в Power Point. Все слайды имеют следующие параметры страницы: ориентация альбомная, формат А4, размер шрифта не менее кегль 24. Оформление титульной страницы включает название, так же указан автор, место, год выполнения. Каждый слайд назван, пронумерован (за исключением титульного), оформление фона слайдов необходимо проводить в спокойных тонах, контрастных цвету выбранного шрифта.

### **VII. Материально-техническое обеспечение**

Для аудиторной работы

Аудитория для лекционных, семинарских занятий, консультаций и самостоятельной работы №311, 170002, Тверская обл., г.

Тверь, просп. Чайковского, д. 70

Компьютерный класс 4В (помещение для самостоятельной работы) 170002,

Тверская обл., г. Тверь, пер. Садовый, д. 35

Столы, стулья, кафедра, доска, стационарный мультимедийный проектор, стационарный экран

Столы, стулья, мультимедийный проектор, стационарный экран, Компьютеры

MS Office 365 pro plus – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017;

MS Windows 10 Enterprise – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017;  
Google Chrome – бесплатное ПО.  
Origin 8.1 Sr2 договор №13918/M4 от 24.09.2009 с ЗАО «СофтЛайн Трейд»;  
ISIS Draw 2.4 Standalone – бесплатное ПО  
HyperChem - акт предоставления прав № Tr008313 от 20.02.2016 г

### **VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины**

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Дополнен список основной и дополнительной литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.			