

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

по учебной работе

_____ Э.Ю. Майкова
« _____ » _____ 202_ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)»

«Квантовая механика и квантовая химия»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Направленность (профиль) – Медицинская и фармацевтическая химия

Тип задач профессиональной деятельности – научно-исследовательский

Форма обучения – очная

Химико-технологический факультет

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Тверь 202_

Рабочая программа дисциплины соответствует ОХОП подготовки бакалавров в части требований к результатам обучения по дисциплине и учебному плану.

Разработчик программы:
доцент кафедры БХС

А.В. Быков

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры БХС
« ____ » _____ 20__ г., протокол № ____.

Заведующий кафедрой

М.Г. Сульман

Согласовано:
Начальник учебно-методического
отдела УМУ

Д.А.Барчуков

Начальник отдела
комплектования
зональной научной библиотеки

О.Ф. Жмыхова

1. Цель и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» является ознакомление студента с идеями и методами квантовой механики и квантовой химии, составляющих основной теоретический фундамент современной теоретической химии.

Задачами дисциплины являются:

- формирование базовых понятий и подходов квантовой химии;
- формирование представлений о методах расчетов молекул, радикалов, ионов и кластеров;
- формирование представлений об интерпретации и границах применимости полученных результатов компьютерных расчетов.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)». Для изучения курса требуются знания, полученные студентами при изучении дисциплин: «Неорганическая химия», «Строение вещества», «Физическая химия».

Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем при подготовке выпускной квалификационной работы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1 Планируемые результаты обучения по дисциплине

Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:

УК-1. Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИУК-1.2. *Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

31. Теоретические основы квантовой химии.

32 Понятие и границы применимости терминов волновая функция и орбиталь.

Уметь:

У1. Оценивать адекватности и границ применимости полученных результатов.

Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:

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

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИОПК-4.1. *Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

31. Базовые принципы расчета геометрии и свойств молекул.

Уметь:

У1. Проводить выбор метода расчета структуры и свойств.

ИОПК-4.3. *Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

31. Базовые принципы расчета энергетических эффектов и энергии активации элементарных реакций.

32 Особенности интерпретации результатов расчетов с позиции современных понятий о химической связи.

Уметь:

У1. Планировать и производить расчет заданных свойств.

У2 Проводить выбор метода расчета структуры и свойств.

3.2. Технологии, обеспечивающие формирование компетенций

Проведение лекционных занятий; выполнение практических работ; самостоятельная работа под руководством преподавателя.

4. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы

Таблица 1. Распределение трудоемкости дисциплины по видам учебной работы

| Вид учебной работы | Зачетные единицы | Академические часы |
|---|-------------------------|---------------------------|
| Общая трудоемкость дисциплины | 2 | 72 |
| Аудиторные занятия (всего) | | 60 |
| В том числе: | | |
| Лекции | | 30 |
| Практические занятия (ПЗ) | | 30 |
| Лабораторные работы (ЛР) | | не предусмотрены |
| Самостоятельная работа обучающихся (всего) | | 12 |
| В том числе: | | |
| Курсовая работа | | не предусмотрена |
| Курсовой проект | | не предусмотрен |
| Расчетно-графические работы | | не предусмотрены |
| Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к практическим занятиям | | 8 |
| Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (зачет) | | 4 |
| Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен) | | не предусмотрен |
| Практическая подготовка при реализации дисциплины (всего) | | 0 |

5. Структура и содержание дисциплины

5.1. Структура дисциплины

Таблица 2. Модули дисциплины, трудоемкость в часах и виды учебной работы

| № | Наименование модуля | Труд-ть часы | Лекции | Практич. занятия | Лаб. практикум | Сам. работа |
|----------------------------|---|--------------|-----------|------------------|----------------|-------------|
| 1 | Введение. Цель и задачи квантовой химии | 4 | 1 | 2 | - | 1 |
| 2 | Классическое описание структуры и динамики молекул | 9 | 4 | 4 | - | 1 |
| 3 | Основные положения квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики. Атом водорода | 6 | 3 | 2 | - | 1 |
| 4 | Многоэлектронные атомы | 5 | 4 | - | - | 1 |
| 5 | Методы расчета молекул. | 22 | 10 | 8 | - | 4 |
| 6 | Взаимодействия в молекулах. Химическая связь | 7 | 2 | 4 | - | 1 |
| 7 | Невалентные взаимодействия в молекулярных системах | 9 | 2 | 6 | - | 1 |
| 8 | Электронное строение твердых тел | 3 | 2 | - | - | 1 |
| 9 | Квантовая химия химических реакций | 7 | 2 | 4 | - | 1 |
| Всего на дисциплину | | 72 | 30 | 30 | - | 12 |

5.2. Содержание дисциплины

МОДУЛЬ 1 «ВВЕДЕНИЕ. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ»

Цель и задачи квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Квантовая теория света Планка – Эйнштейна. Теория Бора. Квантовые числа. Соотношение де Бройля. Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновая механика Шредингера. Стационарное и нестационарное уравнение Шредингера.

МОДУЛЬ 2 «КЛАССИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СТРУКТУРЫ И ДИНАМИКИ МОЛЕКУЛ»

Классическое описание структуры и динамики молекул. Механическая модель молекулы. Молекулярные системы.

МОДУЛЬ 3 «ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. АТОМ ВОДОРОДА»

Основные положения квантовой механики. Оператор. Линейные и самосопряженные (эрмитовы) операторы. Собственные функции и собственные значения операторов. Матричное представление операторов. Базис. Операторы основных физических величин.

Атом водорода. Волновые функции. Квантовые числа. Нормированные присоединенные полиномы Лежандра. Сферические гармоники. Угловые или механические моменты частиц: орбитальный, собственный и полный. Радиальные волновые функции. Радиальные функции распределения. Квантование момента импульса. Собственные значения и собственные функции. Сложение моментов. Векторная модель. Теорема Вириала.

МОДУЛЬ 4 «МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ»

Полная энергия атома. Вариационный принцип решения уравнения Шредингера. Вариационный метод Ритца. Одноэлектронная модель. Метод ССП. Атомные орбитали. ОСТ. Принцип Паули. Метод Хартри-Фока (ОХФ, НХФ, ОХФ-ОО). Метод Кона-Шема (ограниченный и неограниченный). Оболочечная модель атома.

МОДУЛЬ 5 «МЕТОДЫ РАСЧЕТА МОЛЕКУЛ»

Приближение Борна-Оппенгеймера. МО ЛКАО. Уравнение Рутана.

Учет электронной корреляции в орбитальных моделях. Разложение по конфигурациям. Теория возмущений Мёллера-Плессета. Метод связанных кластеров. Метод валентных схем. Метод Кона-Шема для молекул (приближение локальной плотности, локальной спиновой плотности, обобщенное спиновое разложение плотности). Функционалы плотности.

Неэмпирическая квантовая химия. Аналитические базисные функции. ОСТ, ОГТ, СОГТ. Минимальный атомный базисный набор. Расширенный атомный базисный набор. Молекулярные базисные наборы Попла, Корреляционно-согласованные базисные наборы. Точность неэмпирических квантово-механических расчетов.

Импирическая квантовая химия. Основные приближения. Приближение нулевого дифференциального перекрытия (НДП). Методы ППДП/1, ППДП/2, ППДП/С; ЧПДП, МЧПДП/1, МЧПДП/2, МЧПДП/3, ЗЧПДП/1, ЗЧПДП/С. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрытием (ПДП, МПДП). Методы AM1 (Аустинская модель-1), PM3 и т.д.

Разделение сигма- и пи-электронов. пи-электронное приближение. Метод Паризера-Парра-Попла, метод Хюккеля.

Программные комплексы Orca, GAUSSIAN и др.

МОДУЛЬ 6 «ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОЛЕКУЛАХ. ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ»

Теорема о силах. Теорема вириала. Молекулярные орбитали и их классификация. Схемы образования МО в гомоядерных и гетероядерных двухатомных молекулах (корреляционные диаграммы). Анализ заселенности орбиталей. Деформационная электронная плотность. Локализация и

гибридизация орбиталей. Характеристики молекул зависящие от распределения заряда. Эффект Яна-Теллера и структура молекул.

МОДУЛЬ 7 «НЕВАЛЕНТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ. МОЛЕКУЛЫ И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ»

Межмолекулярные взаимодействия. Метод супермолекулы. Метод теории возмущений. Гибридные методы КМ/ММ.

МОДУЛЬ 8 «ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ»

Одноэлектронные волновые функции в бесконечных периодических кристаллах. Электрон в периодическом поле кристалла. Методы расчета волновых функций в кристаллах (бесконечный периодический кристалл, кластерные модели твердых тел).

МОДУЛЬ 9 «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.

5.3. Лабораторные работы

Учебным планом лабораторные работы не предусмотрены.

5.4. Практические занятия

Таблица 3. Тематика, форма практических занятий (ПЗ) и их трудоемкость

| Порядковый номер модуля. Цели практических занятий | Примерная тематика занятий и форма их проведения | Трудоемкость в часах |
|---|---|----------------------|
| Модуль 1 Цель: изучение основных постулатов квантовой химии | Постулаты Бора. Численные расчеты радиусов боровских орбит, энергий отдельных состояний, длин волн спектральных переходов Формула де Бройля и соотношение неопределенностей. Физический смысл и простейшие оценки на их основе | 2 |
| Модуль 2 Цель: изучение классических способов описания молекулы | Частица в потенциальной яме Гармонический осциллятор и инфракрасные спектры молекул Жесткий ротатор | 4 |

| | | |
|--|--|----|
| Модуль 3 Цель: изучение операторов квантовой механики | Основные операторы квантовой механики: координата, импульс, момент импульса (перестановочные соотношения). Гамильтониан. Атомные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Химическая трактовка решений одноэлектронных уравнений | 2 |
| Модули 4, 5 Цель: изучение электронного строения атомов и молекул | 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. Квантово-механические программы. Точность и скорость расчетов. | 8 |
| Модуль 6, 7 Цель: формирование навыков анализа свойств молекул и кластеров на основе расчетов квантово-химических пакетов | Молекулярные орбитали. Схемы образования МО в гомоядерных и гетероядерных двухатомных молекулах (корреляционные диаграммы). Анализ заселенности орбиталей. Расчеты невалентных взаимодействий. | 10 |
| Модуль 9 Цель: формирование навыков расчёта термодинамических характеристик химических реакций | Расчёт термодинамических характеристик и энергий активации элементарных химических реакций. | 4 |

6. Самостоятельная работа обучающихся и текущий контроль успеваемости

6.1. Цели самостоятельной работы

Основными целями самостоятельной работы бакалавров является формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых, рациональных и неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

6.2. Организация и содержание самостоятельной работы

Самостоятельная работа заключается в изучении отдельных тем курса по заданию преподавателя по рекомендуемой им учебной литературе, в подготовке к практическим занятиям, к текущему контролю успеваемости и подготовке к зачету.

После вводных лекций, в которых обозначается содержание дисциплины, ее проблематика и практическая значимость, студентам выдаются задания на практические занятия. Студенты выполняют задания в часы СРС в течение семестра в соответствии с освоением учебных разделов. Защита выполненных

заданий производится поэтапно в часы практических занятий. Оценивание осуществляется путем устного опроса проводится по содержанию и качеству выполненного задания.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

7.1. Основная литература по дисциплине

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие для вузов по хим.-технол. напр. и спец. : в составе учебно-методического комплекса / В.Г. Цирельсон. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с. - (Учебник для высшей школы). - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-9963-0080-8 : 385 р. - (ID=81208-15)

2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособие для вузов по хим. спец. : в составе учебно-методического комплекса / В.И. Барановский. - М. : Академия, 2008. - 383 с. - (Высшее профессиональное образование. Естественные науки). - Библиогр. : с. 379 - 380. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7695-3961-9 : 379 р. 50 к. - (ID=75961-11)

3. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 1. Квантовая механика : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2022. — 183 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00127-3. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/491725> (дата обращения: 07.09.2022) . - (ID=149890-0)

4. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2. Квантовая химия : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2022. — 402 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00128-0. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/491726> (дата обращения: 07.09.2022) . - (ID=149891-0)

7.2. Дополнительная литература по дисциплине

1. Степанов, Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия : учебник для хим. фак. ун-тов : в составе учебно-методического комплекса / Н.Ф. Степанов. - Москва : Мир, 2001 : Московский ун-т. - 520 с. : ил. - (Теорет. основы химии) (УМК-У). - ISBN 5-03-003414-5 : 250 р. - (ID=7873-7)

2. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособие для вузов по спец. ВПО 020101.65 "Химия" : в составе учебно-методического комплекса / А.И. Ермаков. - М. : Юрайт, 2010. - 555 с. - (Основы наук) (УМК-У). - Библиогр. : с. 508 - 516. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-9916-0587-8 (Юрайт) : 528 р. 99 к. - (ID=82846-6)

3. Каплан, И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / И.Г. Каплан. - М. : БИНОМ, 2012. - 394 с. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-94774-939-7 : 440 р. - (ID=83539-15)

4. Доломатов, М. Ю. Физико-химия наночастиц : учебное пособие для вузов / М. Ю. Доломатов, Р. З. Бахтизин, М. М. Доломатова. — 2-е изд., перераб.

и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2022. — 285 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-13077-5. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/496174> (дата обращения: 07.09.2022). - (ID=136308-0)

5. Назмитдинов, Р. Г. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / Р. Г. Назмитдинов, С. А. Новикова. — Дубна : Государственный университет «Дубна», 2021. — 123 с. — ISBN 978-5-89847-631-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/196986> (дата обращения: 07.09.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей. - (ID=149892-0)

6. Бурмистрова, Н. А. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / Н. А. Бурмистрова. — Саратов : СГУ, 2020. — 68 с. — ISBN 978-5-292-04636-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/170586> (дата обращения: 07.09.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей. - (ID=149893-0)

7. Крашенинин, В. И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам : учебное пособие / В. И. Крашенинин, Е. Г. Газенаур, Л. В. Кузьмина. — Кемерово : КемГУ, 2012. — 56 с. — ISBN 978-5-8353-1298-6. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/44352> (дата обращения: 07.09.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей. - (ID=149894-0)

7.3. Методические материалы

1. Экзаменационные вопросы по дисциплине федерального компонента цикла ОПД "Квантовая механика и квантовая химия" для студентов специальности 020100 – Химия : в составе учебно-методического комплекса / Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ ; сост. А.В. Быков. - Тверь : ТвГТУ, 2012. - (УМК-В). - Сервер. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/89976> . - (ID=89976-1)

2. Расширенное описание лекционного курса "Квантовая механика и квантовая химия" для студентов специальности 020100 - Химия : в составе учебно-методического комплекса / Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ ; разработ. А.В. Быков. - Тверь : ТвГТУ, 2012. - (УМК-Л). - Сервер. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/89949> . - (ID=89949-1)

3. Практические занятия по дисциплине федерального компонента цикла ОПД "Квантовая механика и квантовая химия" для студентов специальности 020100 – Химия : в составе учебно-методического комплекса / сост. А.В. Быков ; Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ. - Тверь : ТвГТУ, 2012. - (УМК-П). - Сервер. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/89975> . - (ID=89975-1)

7.4. Программное обеспечение по дисциплине

Операционная система Microsoft Windows: лицензии № ICM-176609 и № ICM-176613 (Azure Dev Tools for Teaching).

Microsoft Office 2007 Russian Academic: OPEN No Level: лицензия № 41902814.

7.5. Специализированные базы данных, справочные системы, электронно-библиотечные системы, профессиональные порталы в Интернет ЭБС и лицензионные ресурсы ТвГТУ размещены:

1. Ресурсы: <https://lib.tstu.tver.ru/header/obr-res>
2. ЭК ТвГТУ: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/Web>
3. ЭБС "Лань": <https://e.lanbook.com/>
4. ЭБС "Университетская библиотека онлайн": <https://www.biblioclub.ru/>
5. ЭБС «IPRBooks»: <https://www.iprbookshop.ru/>
6. Электронная образовательная платформа "Юрайт" (ЭБС «Юрайт»): <https://urait.ru/>
7. Научная электронная библиотека eLIBRARY: <https://elibrary.ru/>
8. Информационная система "ТЕХНОРМАТИВ". Конфигурация "МАКСИМУМ": сетевая версия (годовое обновление): [нормативно-технические, нормативно-правовые и руководящие документы (ГОСТы, РД, СНИПы и др.). Диск 1, 2, 3, 4. - М.: Технорматив, 2014. - (Документация для профессионалов). - CD. - Текст: электронный. - 119600 p. – (105501-1)
9. База данных учебно-методических комплексов: <https://lib.tstu.tver.ru/header/umk.html>

УМК размещен: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/103166>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» используются современные средства обучения, возможна демонстрация лекционного материала с помощью проектора. Аудитория для проведения лекционных занятий, проведения защит и презентаций курсовых работ оснащена современной компьютерной и офисной техникой, необходимым программным обеспечением, электронными учебными пособиями и законодательно-правовой поисковой системой, имеющий выход в глобальную сеть.

9. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

9.1. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме экзамена

Учебным планом экзамен по дисциплине не предусмотрен.

9.2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме зачета

1. Вид промежуточной аттестации в форме зачета.

Вид промежуточной аттестации устанавливается преподавателем.

по результатам текущего контроля знаний и умений, обучающегося без дополнительных контрольных испытаний;

по результатам выполнения дополнительного итогового контрольного испытания при наличии у студентов задолженностей по текущему контролю.

2. При промежуточной аттестации без выполнения дополнительного итогового контрольного испытания студенту в обязательном порядке описываются критерии проставления зачёта:

«зачтено» - выставляется обучающемуся при условии выполнения им всех контрольных мероприятий: посещение лекций в объеме не менее 80% контактной работы с преподавателем, выполнения и защиты заданий на практических занятиях.

При промежуточной аттестации с выполнением заданий дополнительного итогового контрольного испытания студенту выдается билет с вопросами и задачами.

Число заданий для дополнительного итогового контрольного испытания - 15.

Число вопросов – 3 (2 вопроса для категории «знать» и 1 вопрос для категории «уметь»).

Продолжительность – 60 минут.

3. Шкала оценивания промежуточной аттестации – «зачтено», «не зачтено».

4. Критерии выполнения контрольного испытания и условия проставления зачёта:

для категории «знать» (бинарный критерий):

ниже базового - 0 балл;

базовый уровень – 1 балла;

критерии оценки и ее значение для категории «уметь» (бинарный критерий):

отсутствие умения – 0 балл;

наличие умения – 1 балла.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

5. Для дополнительного итогового контрольного испытания студенту в обязательном порядке предоставляется:

база заданий, предназначенных для предъявления обучающемуся на дополнительном итоговом контрольном испытании (типовой образец задания приведен в Приложении);

методические материалы, определяющие процедуру проведения дополнительного итогового испытания и проставления зачёта.

6. Задание выполняется письменно и с использованием ЭВМ. При ответе на вопросы зачета допускается использование справочного материала и непрограммируемого калькулятора при решении задач.

7. **Перечень вопросов дополнительного итогового контрольного испытания**

1. Классическое описание молекулы. Потенциальная энергия молекулы.
2. Приближение гармонического осциллятора. Гармоническое и ангармоническое приближение при рассмотрении пары взаимодействующих атомов.
3. Приближение жёсткого ротатора.
4. Частица в потенциальной яме.
5. Основные положения квантовой механики.
6. Понятие оператора в квантовой химии. Эрмитов оператор. Его свойства. Спектр собственных значений и их физический смысл.
7. Операторы основных физических величин.
8. Минимальный и расширенный атомный базисный набор.
9. Опишите молекулярные базисные наборы Попла.
10. Опишите корреляционно-согласованные базисные наборы.
11. Опишите аналитические базисные функции. СОГТ.
12. Принцип неопределенности Гейзенберга.
13. Метод самосогласованного поля.
14. Приближение Борна-Оппенгеймера.
15. Атомные орбитали и их классификация.
16. Молекулярные орбитали и их классификация.
17. Молекулярные орбитали и их классификация.
18. Интерференция орбиталей.
19. Функция Гамильтона и ее физический смысл.
20. Деформационная электронная плотность.
21. Иерархия методов в квантовой химии.
22. Корреляция электронов и способы её учёта.
23. Опишите суперпозиционную ошибку базисного набора. Методы устранения.
24. Силы в молекулах.
25. Стационарное и нестационарное уравнение Шредингера.
26. Вариационный принцип решения уравнения Шредингера.
27. Опишите одноэлектронную модель.
28. Волновая функция и требования, предъявляемые к ней.
29. Орбитальное уравнение. Радиальная часть волновой функции.
30. Орбитальное уравнение. Угловая часть волновой функции.
31. Метод Хартри-Фока. Функция Хартри и оператор Фока. Достоинства и недостатки метода.
32. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.
33. Метод Кона-Шема. Обменно-корреляционные функционалы.
34. Теорема Вириала.
35. Теория возмущений Мёллера-Плессета.
36. Точность неэмпирических квантово-механических расчетов.
37. Точность полуэмпирических квантово-механических расчетов.
38. Метод связанных кластеров.
39. Метод валентных схем.

40. Эффект Яна-Тэллера и структура молекул.
41. Одноэлектронные волновые функции в бесконечных периодических кристаллах.
42. Методы расчета волновых функций в кристаллах
43. Теорема Блоха. Функция Блоха.
44. Кластерные модели твёрдых тел.
45. Метод супермолекулы.
46. Гибридные методы квантовая механика/молекулярная механика.
47. Химическая жёсткость молекулы.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов задавать студенту в устной форме уточняющие вопросы в рамках задания, выданного студенту.

9.3. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме курсового проекта или курсовой работы

Учебным планом не предусмотрены.

10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Студенты перед началом изучения дисциплины ознакомлены с системами кредитных единиц и балльно-рейтинговой оценки.

Студенты, изучающие дисциплину, обеспечиваются электронными изданиями или доступом к ним, учебно-методическим комплексом по дисциплине, включая методические указания к выполнению практических работ, всех видов самостоятельной работы.

В учебный процесс рекомендуется внедрение субъект-субъектной педагогической технологии, при которой в расписании каждого преподавателя определяется время консультаций студентов по закреплённому за ним модулю дисциплины.

11. Внесение изменений и дополнений в рабочую программу дисциплины

Содержание рабочих программ дисциплин ежегодно обновляется протоколами заседаний кафедры по утвержденной «Положением о структуре, содержании и оформлении рабочих программ дисциплин по образовательным программам, соответствующим ФГОС ВО с учетом профессиональных стандартов» форме.

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия
Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации
Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»
Семестр 7

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО
ИСПЫТАНИЯ № 1**

1. Задание для проверки уровня «знать» – 0 или 1 балл:
Понятие оператора в квантовой химии. Эрмитов оператор. Его свойства.
Спектр собственных значений и их физический смысл.
2. Задание для проверки уровня «знать» – 0 или 1 балл:
Метод Хартри-Фока. Функция Хартри и оператор Фока. Достоинства и
недостатки метода.
3. Задание для проверки уровня «уметь» – 0 или 1 балл:
Определите химическую жесткость двухатомной молекулы если она
обладает следующими характеристиками: энергия ВЗМО -14,0 эВ, энергия
НВМО -1,05 эВ, дипольный момент $0,04 \cdot 10^{-29}$ Клм, длина химической связи 1,13
Å. Энергия образования молекулы -110,5 кДж/моль, силовая константа связи
18,6.

Критерии итоговой оценки за зачет:
«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;
«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман