

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

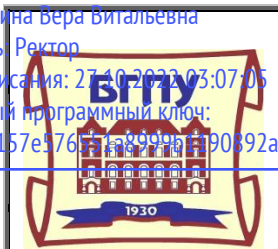
ФИО: Щёкина Вера Витальевна

Должность: Ректор

Дата подписания: 27.10.2023 03:07:05

Уникальный программный ключ:

a2232a55157e576551a8999af190892af53989420420336ffbf573a434e57789



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Благовещенский государственный педагогический университет»**

**ОСНОВНАЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПРОГРАММА
Рабочая программа дисциплины**

УТВЕРЖДАЮ

**Декан естественно-географического
факультета ФГБОУ ВО «БГПУ»**

И.А. Трофимцова

«22» мая 2019 г.

**Рабочая программа дисциплины
СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА С ОСНОВАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

**Направление подготовки
44.03.05 ПЕДАГОГИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ
(с двумя профилями подготовки)**

**Профиль
«БИОЛОГИЯ»**

**Профиль
«ХИМИЯ»**

**Уровень высшего образования
БАКАЛАВРИАТ**

**Принята
на заседании кафедры химии
(протокол № 8 от «15» мая 2019 г.)**

Благовещенск 2019

СОДЕРЖАНИЕ

1 ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА	3
2 УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ	3
3 СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ (ТЕМ)	6
4 МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ (УКАЗАНИЯ) ДЛЯ СТУДЕНТОВ ПО ИЗУЧЕНИЮ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ.....	8
5 ПРАКТИКУМ ПО ДИСЦИПЛИНЕ	10
6 ДИДАКТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ КОНТРОЛЯ (САМОКОНТРОЛЯ) УСВОЕННОГО МАТЕРИАЛА.....	13
7 ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ.....	24
8 ОСОБЕННОСТИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ИНВАЛИДАМИ И ЛИЦАМИ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ	24
9 СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ	24
10 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ БАЗА	25
11 ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ И ДОПОЛНЕНИЙ	27

1 ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

1.1. Цель дисциплины: познакомить студентов с основными понятиями, методами и законами строения вещества и квантовой химии, продемонстрировать возможность их применения в решении проблем современной химии, сформировать у студентов представления о современных квантово-химических расчетах.

1.2 Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Строение вещества с основами квантовой химии» относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений, блока Б1: Б1.В.13.

1.3 Дисциплина направлена на формирование следующих компетенций: ПК-2:

- **ПК-2.** Способен осуществлять педагогическую деятельность по профильным предметам (дисциплинам, модулям) в рамках программ основного общего и среднего общего образования, **индикатором** достижения которой является.

- ПК-2.2 Применяет основы теории фундаментальных и прикладных разделов химии (неорганической, аналитической, органической, физической, химии ВМС, химических основ биологических процессов, химической технологии) для решения теоретических и практических задач.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения. В результате изучения дисциплины студент должен

- **знать:**

- электронное строение атомов и молекул;
- основные законы, явления и процессы, изучаемые строением вещества и квантовой химией;

- **уметь:**

- применять знания об электронном строении молекул для объяснения реакционной способности органических соединений;

- **владеть:**

- математическим аппаратом квантовой химии;
- навыками решения квантовых уравнений.

1.5 Общая трудоемкость дисциплины «Строение вещества с основами квантовой химии» составляет 3 зачетные единицы (далее – ЗЕ) (108 часов).

Программа предусматривает изучение материала на лекциях и лабораторных занятиях. Предусмотрена самостоятельная работа студентов по темам и разделам. Проверка знаний осуществляется фронтально, индивидуально.

1.6 Объем дисциплины и виды учебной деятельности

ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры
Общая трудоемкость	108	10
Аудиторные занятия	54	
Лекции	22	
Лабораторные работы	32	
Самостоятельная работа	54	
Вид итогового контроля		зачет

2 УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ

Учебно-тематический план (очная форма обучения)

№ п/п	Наименование разделов	Всего часов	Виды уч. занятий		
			ЛК	ЛБ	СР
I	<i>Введение. Начала и постулаты квантовой механики. Основы квантовой химии</i>				
	Начала квантовой теории. Гипотеза Планка. Кор-	3	2		1

	пускулярно-волновой дуализм излучения. Теория Н. Бора.				
	Лабораторная работа 1: Начала квантовой теории. Гипотеза Планка.	8		4	4
	Лабораторная работа 2: Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Теория Н. Бора. Постулаты квантовой механики.	6		4	2
	Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц. Уравнение де Бройля. Принцип дополнительности. Принцип неопределенности. Уравнение Шредингера.	3	2		1
	Частные случаи решения уравнения Шредингера. Движение частицы в потенциальном ящике (одномерная и трехмерная задачи). Одномерный жесткий ротатор. Сферический ротатор. Гармонический осциллятор. Понятие о квантовых числах.	4	2		2
	Одноэлектронные атомы. Уравнение Шредингера для атома водорода. Переход к сферическим координатам. Нахождение вида функций.	4	2		2
	Расчет средних величин. Среднее и наиболее вероятное расстояния электрон-ядро. Средние значения потенциальной, кинетической и полной энергий. Теорема вириала. Спектры водородоподобных атомов. Правила отбора.	4	2		2
	Лабораторная работа 3: Расчет средних величин. Среднее и наиболее вероятное расстояния электрон-ядро. Средние значения потенциальной, кинетической и полной энергий.	8		4	4
	Многоэлектронные атомы. Гамильтониан многоэлектронного атома. Нулевое приближение. Одноэлектронное приближение. Квантовые числа многоэлектронных атомов.	4	2		2
	Лабораторная работа 4: Многоэлектронные атомы. Гамильтониан многоэлектронного атома. Нулевое приближение.	6		4	2
	Контрольная работа № 1. Начала квантовой химии	2			2
	Лабораторная работа 5: Квантовые числа многоэлектронных атомов. Термы. Спектры.	8		4	4
II	Строение вещества. Теория химической связи.				
	Теория химической связи. Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод валентных связей. Расчет молекулы водорода. Уточнение расчетов.	4	2		2
	Метод молекулярных орбиталей. Общие положения. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Волновая функция и энергия основного состояния молекулы водорода.	4	2		2
	Лабораторная работа 6: Метод молекулярных ор-	8		4	4

	биталей. Общие положения. Приближение ЛКАО. Уравнения Рутаана. Выбор базисных атомных функций.				
	Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул. Классификация МО Гетероядерные двухатомные и многоатомные молекулы. Электронные конфигурации молекул. Свойства основного состояния молекул.	4	2		2
	Лабораторная работа 7: Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул. Классификация МО. Электронные конфигурации молекул.	8		4	4
	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ). Основные положения. Аннулены. Энергетические диаграммы МО.	4	2		2
	Расчет электронной плотности, заряда, порядка связи, индекса свободной валентности.	4	2		2
	Лабораторная работа 8: Расчет коэффициентов при атомных орбиталях в методе МОХ. Олефины. Полиены.	8		4	4
	Применение метода Хюккеля при корреляции физических свойств сопряженных систем.	2			2
	Контрольная работа № 2. Геометрия молекул. Электрические свойства	2			2
	Всего	108	22	32	54

Интерактивное обучение по дисциплине

№	Тема занятия	Вид занятия	Форма интерактивного занятия	Кол-во часов
1.	Начала квантовой теории. Гипотеза Планка. Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Теория Н. Бора.	ЛК	Лекция-дискуссия	2
2.	Лабораторная работа 2: Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Теория Н. Бора. Постулаты квантовой механики.	ЛР	Работа в малых группах	4
3.	Одноэлектронные атомы. Уравнение Шредингера для атома водорода. Переход к сферическим координатам. Нахождение вида функций.	ЛК	Лекция-консультация	2
4.	Лабораторная работа 5: Квантовые числа многоэлектронных атомов. Термы. Спектры.	ЛР	Работа в малых группах	4
5.	Метод молекулярных орбиталей. Общие положения. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Волновая функция и энергия основного состояния молекулы водорода.	ЛК	Лекция-дискуссия	2
6.	Лабораторная работа 6: Метод молекулярных орбиталей. Общие положения. Приближение ЛКАО. Уравнения Рутаана. Выбор базисных атомных функций.	ЛР	Работа в малых группах	4
	Всего			18

3 СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ (ТЕМ)

1 Введение. Начала и постулаты квантовой механики. Основы квантовой химии

Предмет квантовой механики и квантовой химии. Квантовая теория как основа теоретического фундамента современной химической науки.

Основные этапы развития квантовой теории. Начала квантовой механики. Макромир. Описание в рамках классической механики и электродинамики. Волновая теория электромагнитного излучения. Излучение абсолютно черного тела. Уравнение Планка. Постоянная Планка, ее физический смысл. Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Экспериментальные подтверждения корпускулярных свойств излучения: фотоэффект и эффект Комптона. Попытка применения гипотезы квантования для создания теории строения атомов (Н. Бор).

Гипотеза де Бройля о двойственной природе материи. Экспериментальные доказательства волновых свойств электрона и других микрочастиц. Волны де Бройля.

Принцип неопределенности Гейзенберга как фундаментальный закон природы. Примеры действия принципа неопределенности. Основные следствия принципа неопределенности. Принцип дополнительности (Н. Бор). Его роль в теории познания.

Основы квантовой механики. Основные постулаты и математический аппарат квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики. Операторы. Некоторые свойства операторов. Сложение, умножение операторов, возведение в степень. Коммутатор, антикоммутатор. Собственные функции и собственные значения операторов. Эрмитовы операторы.

Принцип соответствия и операторы физических величин: координат, импульсов, моментов импульсов, кинетической и потенциальной энергии и их свойства. Оператор Лапласа. Оператор Гамильтона. Примеры собственных функций различных операторов.

Основные постулаты квантовой механики.

Общее уравнение волнового движения и его применение Шредингером для описания движения микрочастиц. Функции состояния (волновые функции).

Стационарное уравнение Шредингера. Волновая функция как решение уравнения Шредингера. Интерпретация волновой функции, предложенная М. Борном. Свойства волновой функции. Электронная плотность. Граничная и узловая поверхности. Роль уравнения Шредингера в квантовой механике.

Вероятности результатов измерения физических величин, средние значения.

Частные случаи решения уравнения Шредингера (точно решаемые задачи)

Простейшие примеры применения квантовой механики. Свободное движение частиц. Потенциальный барьер и эффект туннелирования. Квантовая интерференция. Движение частицы в потенциальном ящике (одномерная и трехмерная задачи). Гармонический осциллятор. Одномерный жесткий ротатор. Сферический ротатор. Понятие о квантовых числах и вырожденном состоянии. Закономерности и выводы, следующие из получаемых решений.

Приближенные методы в квантовой механике: вариационный метод и теория возмущений.

Основы квантовой химии. Одноэлектронные атомы

Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Гамильтониан в приближении неподвижного ядра. Переход к сферическим координатам. Разделение волновой функции на радиальную и угловую составляющие. Нахождение вида функций радиальной и угловой составляющих. Система квантовых чисел. Понятие атомной орбитали. Графическое изображение радиальной и угловых частей волновой функции атома водорода. Радиальные функции и радиальные функции распределения атома водорода.

Главное квантовое число и энергия атома водорода. Угловой момент и магнитный орбитальный момент атома. Орбитальное и магнитное квантовые числа. Узловая поверхность. Связь числа узловых поверхностей с орбитальным квантовым числом.

Учет движения ядра атома водорода. Разделение движений ядра и электрона. Приведенная масса. Изотопический эффект.

Расчет средних величин. Наиболее вероятное расстояние электрона от ядра. Среднее расстояние ядро-электрон.

Средние значения потенциальной, кинетической и полной энергий. Теорема вириала. Средняя скорость движения электрона.

Переходы электрона под влиянием электромагнитного излучения. Правила отбора. Влияние внешнего поля: снятие вырождения и расщепление спектральных линий в магнитном и электрическом полях.

Собственный момент количества движения электрона. Спиновое квантовое число. Магнитное спиновое квантовое число. Системы тождественных частиц. Антисимметричность волновой функции для системы электронов.

Многоэлектронные атомы. Уравнение Шредингера для многоэлектронных атомов. Гамильтониан многоэлектронного атома. Невозможность точного решения уравнения Шредингера для многоэлектронной системы. Нулевое приближение. Одноэлектронное приближение. Одноэлектронные волновые функции Хартри. Метод самосогласованного поля.

Приближенные методы решения уравнения Шредингера. Метод возмущения. Вариационные методы. Основные пути введения приближений: упрощение аналитического вида пробных волновых функций, приближенное вычисление интегралов, параметризация на основе экспериментальных данных.

Принцип Паули. Определители Слэтера. Усовершенствование метода Хартри Фоком. Приближенные аналитические функции атомных орбиталей. Атомные орбитали Слэтера. Эффективные главное квантовое число и заряд. Константа экранирования. Потенциал ионизации. Средство к электрону.

Факторы, влияющие на энергию атомных орбиталей многоэлектронных атомов. Энергетические уровни многоэлектронных атомов. Принцип построения периодической системы элементов Д.И. Менделеева.

Спин-орбитальное взаимодействие. Квантовые числа многоэлектронных атомов. Термы атомов. Спектры многоэлектронного атома. Правила отбора. Многоэлектронный атом в магнитном и электрическом полях.

II Структура вещества. Теория химической связи.

Теория химической связи.

Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера (адиабатическое приближение). Потенциальная кривая.

Расчет молекулы водорода Гейтлером и Лондоном. Симметричная и антисимметричная волновые функции. Метод валентных связей. Уточненные расчеты молекулы водорода по методу валентных связей. Синглетное и триплетное состояние молекулы водорода.

Достоинства и недостатки метода валентных связей.

Метод молекулярных орбиталей. Основные положения метода. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей. Правила составления линейных комбинаций атомных орбиталей.

Уравнения Рутаана. Уравнения Рутаана для открытых оболочек. Выбор базисных атомных функций. Электронная корреляция. Метод конфигурационного взаимодействия. Метод многоконфигурационного взаимодействия. Метод теории возмущений.

Молекула водорода по методу МОЛКАО. Кулоновский, обменный интегралы, интегралы перекрывания. Вековое уравнение и вековой определитель. Молекулярные орбитали и энергетические уровни. Основное и возбужденные состояния. Молекулярные термы.

Молекулярные орбитали гомонуклеарных двухатомных молекул. Классификация молекулярных орбиталей по симметрии. σ - и π -Орбитали. Связывающие, разрыхляющие,

несвязывающие орбитали. Энергетические диаграммы молекулярных орбиталей.

Молекулярные орбитали гетеронуклеарных двухатомных молекул.

Теорема Гельмана-Фейнмана. Теорема вириала и природа химической связи. Электростатическая теорема.

Молекулярные орбитали многоатомных молекул. Линейные, угловые, плоские, пирамидальные и тетраэдрические молекулы.

Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета.

Понятие о неэмпирических методах расчета. Полуэмпирические методы расчета молекул. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Основные положения и допущения. Применение к молекулам с сопряженными связями. Аннулены и полиены. Расчет физических свойств сопряженных соединений (потенциалы ионизации и сродство к электрону, электронные спектры поглощения). Индексы реакционной способности π -сопряженных молекул. Электронная плотность, заряды на атомах, порядок связи, индекс свободной валентности, молекулярные диаграммы.

Альтернантные и неальтернантные углеводороды. Свойства альтернантных углеводородов.

Энергетические критерии ароматичности. Хюккелевская и Дьюаровская энергия резонанса.

Применение метода Хюккеля при корреляции физических свойств сопряженных систем. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Электронные спектры поглощения.

Реакционная способность π -сопряженных молекул. Приближение изолированной и реагирующей молекулы. Электрофильное, нуклеофильное, радикальное замещение.

Список основной литературы

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для студ. вузов / В.И. Барановский. – М.: Академия, 2008. – 382 с. (14 экз.)

2. Шарутина, О.К. Задачи и упражнения по основам квантовой механики и квантовой химии: учебное пособие / О.К. Шарутина. – Благовещенск: изд-во БГПУ, 2010. – 203 с. (30 экз.)

3. Грибов, Л. А. Квантовая химия: Учебник / Л.А Грибов, С.П. Муштакова. – М.: «Гардарики», 1999. – 390 с. (40 экз.)

4 МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ (УКАЗАНИЯ) ДЛЯ СТУДЕНТОВ ПО ИЗУЧЕНИЮ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа призвана помочь студентам, обучающимся по направлению «44.03.05-Педагогическое образование», в организации самостоятельной работы по освоению дисциплины «Строение вещества с основами квантовой химии».

Дисциплина «Строение вещества с основами квантовой химии» изучается в 10 семестре. Она представляет собой начальное введение в основной раздел современной теоретической химии, без знания которого работать учителем химии невозможно, как невозможно в настоящее время работать в естественных науках без знания математики.

Предлагаемая учебная программа опирается на цикл дисциплин, изучаемых на 1-2 курсах, таких как «Общая и неорганическая химия», «Физическая и коллоидная химия».

Целью дисциплины «Строение вещества с основами квантовой химии» является последовательное изложение нерелятивистской квантовой теории на основе небольшого числа постулатов. При этом отобран минимальный объем сведений, необходимый для правильного понимания современной квантовой химии. Дисциплина предполагает знание студентами классической механики и классической электродинамики. Квантовая химия оперирует детальной информацией о строении вещества, что позволяет ей объяснить и предсказать многие свойства химических соединений, в том числе такие, которые неподвластны классической теории, например свойства возбужденных состояний.

Строение и свойства химических соединений, их взаимодействия и превращения

рассматриваются на основе представлений квантовой механики и экспериментально установленных закономерностей, в том числе описываемых классической теорией химического строения. Одно из наиболее важных её направлений – изучение элементарных актов химических превращений, выделяемых в последние годы отдельно как химическая динамика. Квантовая химия использует математический аппарат и методы квантовой механики для описания и расчета свойств химических соединений, начиная с атомов и простейших молекул и кончая такими высокомолекулярными соединениями, как, белки, и конденсированными средами, в которых уже невозможно рассматривать отдельные низкомолекулярные фрагменты.

Данная учебная дисциплина имеет следующие задачи:

- Изучение основных постулатов и математического аппарата квантовой механики;
- Изучение приближенных методов решения квантово-механических задач;
- Изучение основных положений строения вещества и квантовой химии;
- Освоение неэмпирических и полуэмпирических методов изучения электронного строения атомов и молекул, качественной теории реакционной способности.

Рабочей программой дисциплины «Строение вещества с основами квантовой химии» предусмотрена самостоятельная работа студентов в объеме 54 часов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- решение задач;
- подготовку к практическим занятиям;
- работу с Интернет-источниками;
- подготовку к выполнению тестовых заданий и сдаче экзамена.

Материал, законспектированный на лекциях, необходимо дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины «Строение вещества с основами квантовой химии». Для успешного усвоения каждого из вопросов для самостоятельного изучения, приведенных в таблице, следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этом вопросе и для освоения последующих разделов дисциплины.

В процессе проведения лабораторного практикума студенты должны закрепить и углубить знания, полученные в лекционном курсе, приобрести практические навыки в решении задач по квантовой механике и квантовой химии, ознакомиться с современными методами анализа строения атома и молекул.

К каждой теме программы даны учебно-методические материалы лекционного курса, включающие план лекции по каждой изучаемой теме и особенности изучаемого материала, приводится список основной и дополнительной литературы.

Представлены задания для самостоятельного изучения дисциплины, вариант контрольной работы, итоговые контрольные тесты, которые позволяют проверить уровень усвоения изученного материала. Контрольные тесты содержат задания разного содержания и уровня сложности, что позволяет достоверно оценить полноту знаний студентов.

Прежде чем приступить к выполнению заданий для самоконтроля, студентам необходимо изучить рекомендуемую по каждой теме литературу. Общий список учебной и учебно-методической литературы представлен в отдельном разделе данной программы. Кроме того, в материалах по подготовке лабораторных занятий и заданий для самостоятельной работы, а также при подготовке к экзамену по каждой теме указана основная и дополнительная литература.

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине

№	Наименование раздела (темы)	Формы/виды самостоятельной работы	Количество часов, в соот-
---	-----------------------------	-----------------------------------	---------------------------

			ветствии с учебно-тематическим планом
I	Введение. Начала и постулаты квантовой механики. Основы квантовой химии	Изучение основной литературы Изучение дополнительной литературы Подготовка отчета по лабораторной работе	28
II	Строение вещества. Теория химической связи.	Изучение основной литературы Изучение дополнительной литературы Подготовка отчета по лабораторной работе Подготовка к контрольной работе	26
	Всего		54

5 ПРАКТИКУМ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

План лабораторных работ

№	Тема лабораторной работы, практического занятия	Практикум
1	Лабораторная работа 1: Начала квантовой теории. Гипотеза Планка.	[1] стр. 5
2	Лабораторная работа 2: Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Теория Н. Бора. Постулаты квантовой механики.	[1] стр. 5
3	Лабораторная работа 3: Расчет средних величин. Среднее и наиболее вероятное расстояния электрон-ядро. Средние значения потенциальной, кинетической и полной энергий.	[1] стр. 48
4	Лабораторная работа 4: Многоэлектронные атомы. Гамильтониан многоэлектронного атома. Нулевое приближение.	[1] стр. 88
5	Лабораторная работа 5: Квантовые числа многоэлектронных атомов. Термы. Спектры.	[1] стр. 88
6	Лабораторная работа 6: Метод молекулярных орбиталей. Общие положения. Приближение ЛКАО. Уравнения Рутаана. Выбор базисных атомных функций.	[1] стр. 109
7	Лабораторная работа 7: Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул. Классификация МО. Электронные конфигурации молекул.	[1] стр. 109
8	Лабораторная работа 8: Расчет коэффициентов при атомных орбиталях в методе МОХ. Олефины. Полиены.	[1] стр. 120

[1] Шарутина, О.К. Задачи и упражнения по основам квантовой механики и квантовой химии: учебное пособие / О.К. Шарутина. – Благовещенск: изд-во БГПУ, 2010. – 203 с.

ЛИТЕРАТУРА

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для студ. вузов / В.И. Барановский. – М.: Академия, 2008. – 382 с. (14 экз.)
2. Шарутина, О.К. Задачи и упражнения по основам квантовой механики и квантовой химии: учебное пособие / О.К. Шарутина. – Благовещенск: изд-во БГПУ, 2010. – 203 с. (30 экз.)
3. Грибов, Л. А. Квантовая химия: Учебник / Л.А Грибов, С.П. Муштакова. – М.: «Гардарики», 1999. – 390 с. (40 экз.)

Вопросы к лабораторным работам

Лабораторная работа 1: Начала квантовой теории. Гипотеза Планка.

1. Начала квантовой теории. Излучение абсолютно черного тела. Гипотеза Планка о квантах. Уравнение Планка. Постоянная Планка, ее физический смысл.
2. Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Уравнение Эйнштейна для фото-

нов. Экспериментальное подтверждение корпускулярных свойств излучения (фотоэффект).

3. Эффект Комптона как проявление корпускулярных свойств электромагнитного излучения.

4. Применение идей квантования для создания теории строения атома (Н. Бор). Расчет радиуса, скорости и энергии электрона в атоме водорода. Обоснование линейчатой структуры спектра атома водорода.

Лабораторная работа 2: Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Теория Н. Бора. Постулаты квантовой механики.

1. Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц. Гипотеза Луи де Бройля о двойственной природе материи.

2. Экспериментальные доказательства волновых свойств микрочастиц. Волны де Бройля.

3. Принцип дополнительности Бора.

4. Принцип неопределенности Гейзенберга. Примеры действия принципа неопределенности. Следствие принципа неопределенности.

5. Классическая и квантовая механики и соотношение между ними.

6. Общее уравнение волнового движения и его применение Шредингером для описания движения микрочастиц. Значение уравнения Шредингера в квантовой механике.

7. Волновая функция как решение уравнения Шредингера. Интерпретация волновой функции Борном. Свойства волновой функции. Электронная плотность. Граничная и узловая поверхности.

8. Постулаты квантовой механики.

9. Понятие об операторах. Операторы основных физических величин (координат, импульса, момента импульса, кинетической и потенциальной энергии) и их свойства. Оператор Лапласа и оператор Гамильтона.

10. Решение уравнения Шредингера для одномерного потенциального ящика. Закономерности и выводы, следующие из получаемых решений. Туннельный эффект.

11. Решение уравнения Шредингера для трехмерного потенциального ящика. Закономерности и выводы, следующие из получаемых решений. Понятие о квантовых числах и вырожденном состоянии.

12. Решение уравнения Шредингера для жесткого ротатора. Закономерности и выводы.

13. Гармонический осциллятор.

Лабораторная работа 3: Расчет средних величин. Среднее и наиболее вероятное расстояния электрон-ядро. Средние значения потенциальной, кинетической и полной энергий.

1 Собственный момент количества движения электрона, спиновое квантовое число. Магнитное спиновое квантовое число.

2 Расчет средних величин. Наиболее вероятное расстояние электрона от ядра. Среднее расстояние ядро-электрон.

3 Средняя скорость движения электрона. Средние значения потенциальной, кинетической и полной энергий. Теорема вириала.

4 Учет движения ядра атома водорода. Разделение движений ядра и электрона. Приведенная масс. Изотопический эффект.

Лабораторная работа 4: Многоэлектронные атомы. Гамильтониан многоэлектронного атома. Нулевое приближение.

1 Спектры водородоподобных атомов. Переходы электронов под влиянием электромагнитного излучения. Правила отбора. Влияние внешнего поля: снятие вырождения и расщепление спектральных линий в магнитном и электрическом полях.

2 Уравнение Шредингера для многоэлектронных атомов. Гамильтониан многоэлектронного атома. Невозможность точного решения уравнения Шредингера для многоэлек-

тронной системы. Нулевое приближение.

3 Уравнение Шредингера для многоэлектронных атомов. Одноэлектронное приближение. Одноэлектронные волновые функции Хартри. Метод самосогласованного поля.

4 Принцип Паули. Определители Слэтера. Усовершенствование метода Хартри Фоком.

Лабораторная работа 5: Квантовые числа многоэлектронных атомов. Термы. Спектры.

1 Подход к решению уравнения Шредингера для атома водорода в приближении неподвижного ядра. Переход к сферическим координатам. Разделение волновой функции на радиальную и угловую составляющие.

2 Нахождение вида функций радиальной и угловой составляющих волновой функции. Система квантовых чисел.

3 Понятие атомной орбитали. Способы графического изображения радиальной и угловой составляющих волновой функции. Узловая поверхность.

4 Физический смысл квантовых чисел n , l , m_l . Угловой и магнитный моменты атома. Основное, возбужденное, вырожденное состояния атома водорода.

Лабораторная работа 6: Метод молекулярных орбиталей. Общие положения. Приближение ЛКАО. Уравнения Рутаана. Выбор базисных атомных функций.

1 Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера (адиабатическое приближение).

2 Расчет молекулы водорода Гейтлером и Лондоном. Симметричная и антисимметричная волновые функции. Потенциальная кривая. Значение работы Гейтлера и Лондона.

3 Уточненные расчеты молекулы водорода по методу валентных связей. Достоинства и недостатки метода валентных связей.

4 Основные положения метода молекулярных орбиталей. Аналогия с теорией многоэлектронного атома. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (МО ЛКАО).

Лабораторная работа 7: Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул. Классификация МО. Электронные конфигурации молекул.

1 Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутаана. Уравнения Рутаана для открытых оболочек. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока.

2 Выбор базисных атомных функций в разложении ЛКАО. Электронная корреляция. Метод конфигурационного взаимодействия. Метод теории возмущений Меллера-Плессета.

3 Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Волновая функция и энергия основного состояния.

4 Классификация молекулярных орбиталей двухатомных гомоядерных молекул. σ -, π - Орбитали. Связывающие, разрыхляющие, несвязывающие орбитали. Четные, нечетные орбитали. Энергетические диаграммы молекулярных орбиталей.

5. Гомонуклеарные двухатомные молекулы элементов II периода в методе МО. Гетеронуклеарные двухатомные молекулы.

6. Теорема Гельмана-Фейнмана.

7. Теорема вириала и природа химической связи.

8. Электростатическая теорема.

Лабораторная работа 8: Расчет коэффициентов при атомных орбиталях в методе МОХ. Олефины. Полиены.

1 Приближенные аналитические функции атомных орбиталей. Атомные орбитали Слэтера. Эффективные главное квантовое число и заряд. Константа экранирования.

2 Факторы, влияющие на энергию атомных орбиталей многоэлектронных атомов. Энергетические уровни многоэлектронных атомов. Принцип построения Периодической системы Д.И. Менделеева.

3 Спин-орбитальное взаимодействие. Квантовые числа многоэлектронных атомов.

4 Термы многоэлектронных атомов. Спектры многоэлектронных атомов. Правила отбора.

5 Молекулярные орбитали полиядерных молекул. Трехатомные линейные молекулы в методе МО. Построение трехцентровых МО для молекул без π -связей (BeH_2) и с π -связями (BeF_2). Энергетические диаграммы МО.

6 Молекулярные орбитали полиядерных молекул. Угловые (H_2O) и тетраэдрические молекулы (CH_4).

7 Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета молекул. σ -, π -Приближение. Полуэмпирический метод молекулярных орбиталей Хюккеля.

8 Расчет энергий молекулярных орбиталей в методе МОХ. Аннулены. Система циклопропена. Энергетическая диаграмма молекулярных орбиталей. Устойчивость радикала, катиона, аниона.

9 Аннулены в методе МОХ. Правило Хюккеля. Ароматичность и антиароматичность.

6 ДИДАКТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ КОНТРОЛЯ (САМОКОНТРОЛЯ) УСВОЕННОГО МАТЕРИАЛА

6.1 Оценочные средства, показатели и критерии оценивания компетенций

Индекс компетенции	Оценочное средство	Показатели оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций
ПК-2	Отчет по лабораторной работе, зачет	Низкий – неудовлетворительно	ставится, если допущены существенные ошибки (в ходе эксперимента, в объяснении, в оформлении работы, по технике безопасности, в работе с веществами и приборами), которые не исправляются даже по указанию преподавателя.
		Пороговый – удовлетворительно	ставится, если допущены одна-две существенные ошибки (в ходе эксперимента, в объяснении, в оформлении работы, по технике безопасности, в работе с веществами и приборами), которые исправляются с помощью преподавателя.
		Базовый – хорошо	а) работа выполнена правильно, без существенных ошибок, сделаны выводы; б) допустимы: неполнота проведения или оформления эксперимента, одна-две несущественные ошибки в проведении или оформлении эксперимента, в правилах работы с веществами и приборами
		Высокий – отлично	а) работа выполнена полно, правильно, без существенных ошибок, сделаны выводы; б) эксперимент осуществлен по плану с учетом техники безопасности и правил работы с веществами и приборами; в) имеются организационные навыки (поддерживается чистота рабочего места и порядок на столе, экономно используются реактивы).

	Контрольная работа, зачет	Низкий – неудовлетворительно	допустил число ошибок и недочетов превосходящее норму, при которой может быть выставлена оценка «3»
		Пороговый – удовлетворительно	если студент правильно выполнил не менее половины работы или допустил: не более двух грубых ошибок; или не более одной грубой и одной негрубой ошибки и одного недочета; или не более двух-трех негрубых ошибок; или одной негрубой ошибки и трех недочетов; или при отсутствии ошибок, но при наличии четырех-пяти недочетов.
		Базовый – хорошо	студент выполнил работу полностью, но допустил в ней: не более одной негрубой ошибки и одного недочета или не более двух недочетов
		Высокий – отлично	работа выполнена без ошибок, указаны все расчетные формулы, единицы измерения, без ошибок выполнены математические расчеты
ПК-2	Тест	Низкий – до 60 баллов (неудовлетворительно)	за верно выполненное задание тестируемый получает максимальное количество баллов, предусмотренное для этого задания, за неверно выполненное – ноль баллов. После прохождения теста суммируются результаты выполнения всех заданий. Подсчитывается процент правильно выполненных заданий теста, после чего этот процент переводится в оценку, руководствуясь указанными критериями оценивания.
		Пороговый – 61-75 баллов (удовлетворительно)	
		Базовый – 76-84 баллов (хорошо)	
		Высокий – 85-100 баллов (отлично)	

6.2 Промежуточная аттестация студентов по дисциплине

Промежуточная аттестация является проверкой всех знаний, навыков и умений студентов, приобретённых в процессе изучения дисциплины. Формой промежуточной аттестации по дисциплине является зачёт/экзамен.

Для оценивания результатов освоения дисциплины применяются следующие критерии оценивания.

Общая классификация ошибок

При оценке знаний, умений, навыков следует учитывать все ошибки (грубые и негрубые) недочёты.

Грубыми считаются ошибки:

- незнание определения основных понятий, законов, правил, основных положений, теории, незнание формул, общепринятых символов обозначений величин, единиц их измерения, наименований этих единиц;
- неумение выделить в ответе главное; обобщить результаты изучения;
- неумение применить знания для решения задач, объяснения явления;
- неумение читать и строить графики, принципиальные схемы;

- неумение подготовить установку или лабораторное оборудование, провести опыт, наблюдение, сделать необходимые расчёты или использовать полученные данные для выводов;

- неумение пользоваться первоисточниками, учебником, справочником;
- нарушение техники безопасности, небрежное отношение к оборудованию, приборам, материалам.

К негрубым ошибкам относятся:

- неточность формулировок, определений, понятий, законов, теорий, вызванная неполнотой охвата основных признаков определяемого понятия или заменой 1 - 3 из этих признаков второстепенными;

- ошибки при снятии показаний с измерительных приборов, не связанные с определением цены деления шкалы;

- ошибки, вызванные несоблюдением условий проведения опыта, наблюдения, условий работы прибора, оборудования;

- ошибки в условных обозначениях на схемах, неточность графика;

- нерациональный метод решения задачи, выполнения части практической работы, недостаточно продуманный план устного ответа (нарушение логики изложения, подмена отдельных основных вопросов второстепенными);

- нерациональные методы работы со справочной литературой;

- неумение решать задачи, выполнять задания в общем виде.

Недочётами являются:

- нерациональные приёмы вычислений и преобразований, выполнения опытов, наблюдений, практических заданий;

- арифметические ошибки в вычислениях;

- небрежное выполнение записей, чертежей, схем, графиков, таблиц;

- орфографические и пунктуационные ошибки.

Критерии оценивания устного ответа на зачете

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если:

1. вопросы раскрыты, изложены логично, без существенных ошибок;
2. показано умение иллюстрировать теоретические положения конкретными примерами;

3. продемонстрировано усвоение ранее изученных вопросов, сформированность компетенций, устойчивость используемых умений и навыков.

Допускаются незначительные ошибки.

Оценка «не зачтено» выставляется, если:

1. не раскрыто основное содержание учебного материала;
2. обнаружено незнание или непонимание большей или наиболее важной части учебного материала;

3. допущены ошибки в определении понятий, которые не исправлены после нескольких наводящих вопросов;

4. не сформированы компетенции, умения и навыки.

6.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов освоения дисциплины

Варианты контрольных работ

Контрольная работа № 1. Начала квантовой химии

Вариант 1

1. Покажите, что $(A + x)^2 = A^2 + 2xA + x^2 + 1$, где $A = \frac{\partial}{\partial x}$.

2. Вычислите коммутатор $[1/x, P_x^2]$.

3. Длина одномерного потенциального ящика равна 10 нм. Какова вероятность нахождения частицы между $x = 4.95$ и 5.05 нм, если она находится в основном состоянии?

4. Рассчитайте расстояние между двумя низшими энергетическими уровнями молекулы кислорода в емкости длиной 5 см, значение энергии выразите в кДж и кДж/моль. При какой величине квантового числа n энергия молекулы равна $1/2 kT$, если $T = 300 \text{ K}$? (k – постоянная Больцмана $1.381 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{K}^{-1}$).

5. Фотоэлектрический эффект является основой спектрального метода, носящего название фотоэлектронной спектроскопии. Рентгеновский фотон с длиной волны 150 пм проскакивает во внутреннюю часть атома и выбивает электрон. Скорость последнего была измерена, и было установлено, что она составляет $2.14 \cdot 10^7 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$. Как прочно был связан электрон в атоме?

Контрольная работа № 2. Геометрия молекул. Электрические свойства

Вариант 1

- Предскажите тип гибридизации орбиталей центрального атома и геометрическую форму следующих частиц: BeBr_2 , CS_2 , NO_2^- , SeO_2 , BiBr_3 , AsF_5 .
- Предскажите строение и оцените углы между связями для следующих молекул и ионов: UO_2^{2+} , AsCl_4^+ , SCl_4 , $\text{C}_6\text{H}_5\text{JCl}_2$, HNCS , COBr_2 .
- Определите элементы симметрии равновесных геометрических конфигураций этих частиц и принадлежность к той или иной точечной группе симметрии.
 - Молекулы в переменном электрическом поле.
 - Дипольный момент и электронное строение молекулы. Факторы, влияющие на величину дипольного момента. Примеры.
 - Дипольный момент молекулы Cl_2O составляет 0.78 D. Рассчитайте дипольный момент связи, если валентный угол в молекуле Cl_2O равен 115° .
 - Дипольный момент толуола равен 0.4 D. Оцените дипольные моменты трех ксилолов. Какой ответ можно считать безошибочным? Почему?

Вопросы к зачету

- Начала квантовой теории. Излучение абсолютно черного тела. Гипотеза Планка о квантах. Уравнение Планка. Постоянная Планка, ее физический смысл.
- Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Уравнение Эйнштейна для фотонов. Экспериментальное подтверждение корпускулярных свойств излучения (фотоэффект).
- Эффект Комптона как проявление корпускулярных свойств электромагнитного излучения.
- Применение идей квантования для создания теории строения атома (Н. Бор). Расчет радиуса, скорости и энергии электрона в атоме водорода. Обоснование линейчатой структуры спектра атома водорода.
- Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц. Гипотеза Луи де Бройля о двойственной природе материи. Экспериментальные доказательства волновых свойств микрочастиц. Волны де Бройля.
- Принцип дополнительности Бора. Принцип неопределенности Гейзенберга. Примеры действия принципа неопределенности. Следствие принципа неопределенности. Классическая и квантовая механики и соотношение между ними.
- Общее уравнение волнового движения и его применение Шредингером для описания движения микрочастиц. Значение уравнения Шредингера в квантовой механике.
- Волновая функция как решение уравнения Шредингера. Интерпретация волновой функции Борном. Свойства волновой функции. Электронная плотность. Граничная и узловая поверхности.
- Постулаты квантовой механики.
- Понятие об операторах. Операторы основных физических величин (координат, импульса, момента импульса, кинетической и потенциальной энергии) и их свойства. Оператор Лапласа и оператор Гамильтона.

11. Решение уравнения Шредингера для одномерного потенциального ящика. Закономерности и выводы, следующие из получаемых решений. Туннельный эффект.
12. Решение уравнения Шредингера для трехмерного потенциального ящика. Закономерности и выводы, следующие из получаемых решений. Понятие о квантовых числах и вырожденном состоянии.
13. Решение уравнения Шредингера для жесткого ротатора. Закономерности и выводы.
14. Гармонический осциллятор.
15. Подход к решению уравнения Шредингера для атома водорода в приближении неподвижного ядра. Переход к сферическим координатам. Разделение волновой функции на радиальную и угловую составляющие.
16. Нахождение вида функций радиальной и угловой составляющих волновой функции. Система квантовых чисел.
17. Понятие атомной орбитали. Способы графического изображения радиальной и угловой составляющих волновой функции. Узловая поверхность.
18. Физический смысл квантовых чисел n , l , m_l . Угловой и магнитный моменты атома. Основное, возбужденное, вырожденное состояния атома водорода.
19. Собственный момент количества движения электрона, спиновое квантовое число. Магнитное спиновое квантовое число.
20. Расчет средних величин. Наиболее вероятное расстояние электрона от ядра. Среднее расстояние ядро-электрон.
21. Средняя скорость движения электрона. Средние значения потенциальной, кинетической и полной энергий. Теорема вириала.
22. Учет движения ядра атома водорода. Разделение движений ядра и электрона. Приведенная масса. Изотопический эффект.
23. Спектры водородоподобных атомов. Переходы электронов под влиянием электромагнитного излучения. Правила отбора. Влияние внешнего поля: снятие вырождения и расщепление спектральных линий в магнитном и электрическом полях.
24. Уравнение Шредингера для многоэлектронных атомов. Гамильтониан многоэлектронного атома. Невозможность точного решения уравнения Шредингера для многоэлектронной системы. Нулевое приближение.
25. Уравнение Шредингера для многоэлектронных атомов. Одноэлектронное приближение. Одноэлектронные волновые функции Хартри. Метод самосогласованного поля.
26. Принцип Паули. Определители Слэтера. Усовершенствование метода Хартри-Фоком.
27. Приближенные аналитические функции атомных орбиталей. Атомные орбитали Слэтера. Эффективные главное квантовое число и заряд. Константа экранирования.
28. Факторы, влияющие на энергию атомных орбиталей многоэлектронных атомов. Энергетические уровни многоэлектронных атомов. Принцип построения Периодической системы Д.И. Менделеева.
29. Спин-орбитальное взаимодействие. Квантовые числа многоэлектронных атомов.
30. Термы многоэлектронных атомов. Спектры многоэлектронных атомов. Правила отбора.
31. Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера (адиабатическое приближение).
32. Расчет молекулы водорода Гейтлером и Лондоном. Симметричная и антисимметричная волновые функции. Потенциальная кривая. Значение работы Гейтлера и Лондона.
33. Уточненные расчеты молекулы водорода по методу валентных связей. Достоинства и недостатки метода валентных связей.
34. Основные положения метода молекулярных орбиталей. Аналогия с теорией многоэлектронного атома. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (МО

ЛКАО).

35. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутаана. Уравнения Рутаана для открытых оболочек. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока.

36. Выбор базисных атомных функций в разложении ЛКАО. Электронная корреляция. Метод конфигурационного взаимодействия. Метод теории возмущений Меллера-Плессета.

37. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Волновая функция и энергия основного состояния.

38. Классификация молекулярных орбиталей двухатомных гомоядерных молекул. σ -, π - Орбитали. Связывающие, разрыхляющие, несвязывающие орбитали. Четные, нечетные орбитали. Энергетические диаграммы молекулярных орбиталей.

39. Гомонуклеарные двухатомные молекулы элементов II периода в методе МО. Гетеронуклеарные двухатомные молекулы.

40. Теорема Гельмана-Фейнмана.

41. Теорема вириала и природа химической связи.

42. Электростатическая теорема.

43. Молекулярные орбитали полиядерных молекул. Трехатомные линейные молекулы в методе МО. Построение трехцентровых МО для молекул без π -связей (BeH_2) и с π -связями (BeF_2). Энергетические диаграммы МО.

44. Молекулярные орбитали полиядерных молекул. Угловые (H_2O) и тетраэдрические молекулы (CH_4).

45. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета молекул. σ -, π - Приближение. Полуэмпирический метод молекулярных орбиталей Хюккеля.

46. Расчет энергий молекулярных орбиталей в методе МОХ. Аннулены. Система циклопропила. Энергетическая диаграмма молекулярных орбиталей. Устойчивость радикала, катиона, аниона.

47. Аннулены в методе МОХ. Правило Хюккеля. Ароматичность и антиароматичность.

48. Применение метода Хюккеля к молекулам с сопряженными связями (непредельные углеводороды). Этилен. Аллил.

49. Метод МОХ. Бутадиен. Высшие полиены.

50. Применение квантово-механических расчетов в химии (электронная плотность, заряды на атомах, порядок связи, индекс свободной валентности, молекулярные диаграммы).

51. Альтернантные и неальтернантные углеводороды. Свойства альтернантных углеводородов.

52. Энергетические критерии ароматичности. Хюккелевская и Дьюаровская энергии резонанса.

53. Применение метода Хюккеля при корреляции физических свойств сопряженных систем. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Электронные спектры поглощения.

54. Реакционная способность π -сопряженных молекул. Приближение изолированной и реагирующей молекулы. Электрофильное, нуклеофильное, радикальное замещение.

Тестовые задания для самоконтроля

Основные понятия квантовой механики

1. Волновая функция $\Psi(\{x\}, t)$ должна быть

а) положительной

б) дифференцируемой

в) действительной

г) антисимметричной

2. Общие требования к волновой функции. Волновая функция $\Psi(\{x\}, t)$ должна быть
- а) определенной во всей области изменения переменных
 - б) неотрицательной
 - в) конечной
 - г) однозначной
 - д) симметричной
 - е) антисимметричной
3. В качестве единицы массы в атомной системе единиц (системе Хартри) используется
- а) масса протона
 - б) масса нейтрона
 - в) масса атома водорода (протия)
 - г) $1/12$ массы атома углерода ^{12}C
 - д) масса электрона
4. Если изменить знак волновой функции (умножить волновую функцию на -1), полная энергия системы:
- а) увеличится
 - б) не изменится
 - в) уменьшится
 - г) изменится в зависимости от рассматриваемой системы
 - д) изменится непредсказуемым образом
5. В квантовой механике одновременно не могут быть определены с любой точностью
- а) энергия и время
 - б) координаты и скорость
 - в) импульс и энергия
 - г) импульс и координаты
6. Собственные значения эрмитова оператора всегда
- а) образуют непрерывный спектр
 - б) комплексные
 - в) действительные
 - г) положительные
 - д) отрицательные
 - е) равны между собой
7. Для линейного оператора A верно
- а) $A(a_1f_1+a_2f_2)=a_1Af_1+a_2Af_2$
 - б) $A(f_1+f_2)=Af_1Af_2$

- в) $Aaf = aAf$
- г) $Af_1f_2 = Af_1 + Af_2$
9. Для коммутирующих операторов A_1 и A_2 верно
- а) $[A_1, A_2] = 0$
- б) $[A_1, A_2] = [A_2, A_1]$
- в) $A_1f_1 + A_2f_2 = A_1A_2f_1f_2$
- г) $A_1A_2f = A_2A_1f$
- д) $A_1f_1A_2f_2 = A_1f_2A_2f_1$
10. Линейными операторами являются

<input type="checkbox"/> а) $Af = -f$
<input type="checkbox"/> б) $Af = f^2$

МНОГОЭЛЕКТРОННЫЙ АТОМ Основные приближения

1. Выражения для члена в гамильтониане, который описывает кулоновское взаимодействие N электронов

а)
$$-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \quad \text{б) } \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i \neq j)$$

в)
$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i < j) \quad \text{г) } - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i < j)$$

д)
$$\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial y_i} + \frac{\partial}{\partial z_i} \right)$$

2. Выражения для члена в гамильтониане, который описывает кинетическую энергию N электронов

а)
$$-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) \quad \text{б) } \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i \neq j)$$

в)
$$-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \quad \text{г) } - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i < j) \quad \text{д) } \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i < j)$$

3. Соответствие между названиями операторов и их формулами (в системе Хартри для одного электрона)

Оператор	Формула
1. Координата x	$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(r)$
2. Полная энергия	x

3. Кинетическая энергия	$-i\frac{\partial}{\partial x}$
4. Импульс вдоль оси x	$-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$

4. Если $\{E_i\}$ — набор собственных значений гамильтониана H в уравнении $H\Psi_i = E_i\Psi_i$, то

$$\sum_{i=0}^N E_i$$

а) $\sum_{i=0}^N E_i$ - полная энергия системы

б) E_i - энергия системы в i -ом состоянии

в) E_0 - энергия системы, а E_i при $i \neq 0$ величины, не имеющие физического смысла

$$\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N E_i$$

г) $\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N E_i$ - полная энергия системы

д) $E_i = E_j$ для любых i, j

□

МНОГОЭЛЕКТРОННЫЙ АТОМ

Атомные орбитали

1. Радиальная часть волновой функции определяется квантовым числом (квантовыми числами): а) n, l б) l, m_l в) m_l, m_s

2. Энергия электронных орбиталей определяются только одним квантовым числом в системах: а) H_2 б) H^+ в) H^- г) H_d д) He е) He^+

3. Интеграл от произведения двух атомных радиальных функций $R_{n,l}$ с различными значениями n , полученных в результате точного решения уравнения Шредингера:

а) зависит от условий нормировки б) всегда равен 1 в) всегда равен 0

г) равен бесконечности д) зависит от значения l

4. Выберите правильные утверждения. Радиальная составляющая волновой функции

а) входит в состав волновой функции электрона в атоме $\Psi(r, \theta, \varphi)$ как множитель $R_{n,l}(r)$; б) $R \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$; в) $R \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow \infty$; г) волновые функции с одинаковыми $R_{n,l}(r)$ вырождены по энергии

5. Угловая часть волновой функции определяется квантовыми числами: а) n ; б) l ; в) m_l ; г) m_s .

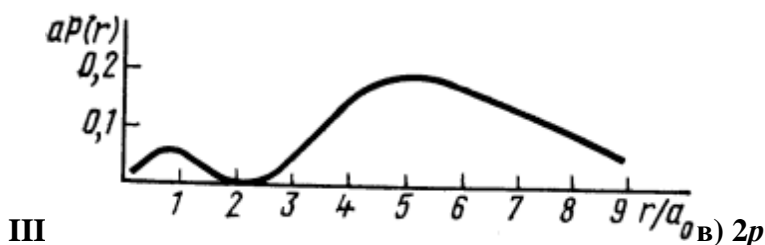
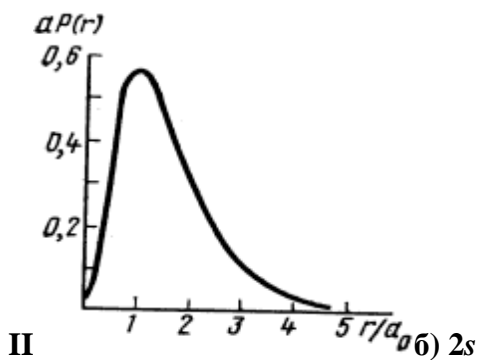
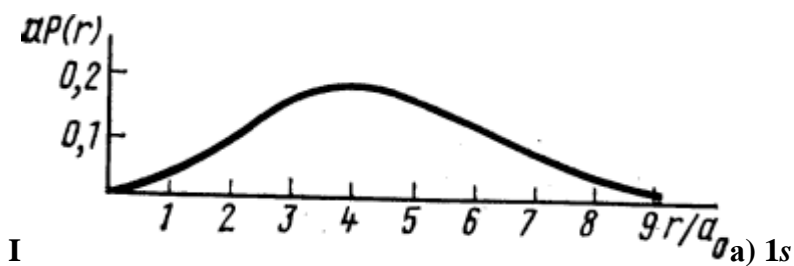
6. Энергия электрона в атоме гелия определяется значением квантового числа (значениями квантовых чисел): а) n ; б) l ; в) m_l ; г) m_s .

7. Число узловых поверхностей угловой составляющей волновой функции орбитали $2s$: а) 0; б) 1; в) 2; г) 3.

8. Число сферических узловых поверхностей радиальной составляющей волновой функции орбитали $3p$: а) 0; б) 1; в) 2; г) 3.

9. Число плоских узловых поверхностей волновой функции орбитали $3d_{yz}$: а) 0; б) 1; в) 2; г) 3.

10. Соответствие между обозначениями электронных орбиталей и их радиальными функциями распределения $aP(r)$:



Тест по квантовой механике и квантовой химии
для студентов специальности «44.03.05– Педагогическое образование»

Инструкция для студентов

Тест содержит 25 заданий, из них 10 заданий – часть А, 7 заданий – часть В, 5 заданий – часть С. На выполнение теста отводится 90 минут. Если задание не удастся выполнить сразу, перейдите к следующему. Если останется время, вернитесь к пропущенным заданиям. Верно выполненные задания части А оцениваются в 1 балл, части В – 2 балла, части С – 5 баллов.

ЧАСТЬ А

К каждому заданию части А даны несколько ответов, из которых только один верный. Выполнив задание, выберите верный ответ и укажите его в бланке ответов.

A1. Уравнение Планка связывает следующие физические характеристики:

- а) Энергию и массу. б) Интенсивность излучения и длину волны.
- в) Энергию и частоту излучения. г) Импульс и длину волны.

A2. Соотношение Луи Де Бройля отражает:

- а) Корпускулярно-волновой дуализм излучения.
- б) Зависимость энергии падающего излучения и скорости выбитых электронов.
- в) Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц.
- г) Зависимость длины волны и частоты излучения.

A3. Для каких многоатомных молекул можно использовать метод МО Хюккеля?

- а) Алканы. б) Карбоновые кислоты и их производные.
- в) Аннулены. г) Амины.

A4. Атомная орбиталь характеризуется набором квантовых чисел:

- а) 3. б) 4. в) 2. г) 5.

A5. Главное квантовое число определяет:

- а) Энергию и направленность АО. б) Энергию и средние размеры АО.
в) Энергию и орбитальный магнитный момент АО. г) Энергию и форму АО.

A6. Атомный терм характеризует:

- а) Основное состояние атома. б) Возбужденное состояние атома. в) Валентное состояние атома. г) Определенное энергетическое состояние атома.

A7. Энергия АО многоэлектронного атома определяется:

- а) Значениями главного квантового числа, орбитального квантового числа, магнитного квантового числа.
б) Значениями главного квантового числа, орбитального квантового числа, зарядом ядра.
в) Значениями главного квантового числа, магнитного квантового числа, спинного квантового числа.

- г) Зарядом ядра, размерами орбитали, формой орбитали.

A8. Устойчивой циклопропенильной системой является:

- а) Анион. б) Катион. в) Радикал.

A9. Порядок связи в молекуле определяется:

- а) Разницей между числом электронов на связывающих и разрыхляющих МО.
б) Числом электронов на связывающих МО. в) Всеми электронами в молекуле. г) Разницей между числом электронов на связывающих и разрыхляющих МО, деленной пополам.

A10. Оператор Гамильтона – это:

- а) Оператор кинетической энергии. б) Оператор потенциальной энергии.
в) Оператор полной энергии. г) Оператор импульса.

ЧАСТЬ В

Будьте внимательны! Задания части В могут быть 3-х типов:

- 1) задания, содержащие несколько верных ответов;
- 2) задания на установление соответствия;
- 3) задания, в которых ответ должен быть дан в виде числа, слова, символа.

В1. Зная вид волновой функции, можно рассчитать:

- а) Распределение электронной плотности. б) Потенциал ионизации.
в) Среднее значение некоторой физической величины. г) Заряд ядра.

В2. Волновая функция должна удовлетворять следующим условиям:

- а) Неоднозначность. б) Конечность. в) Непрерывность. г) Условие нормировки.
д) Зависимость только от одной переменной.

В3. Соотношение неопределенностей регулирует точность одновременного определения:

- а) Массы и энергии. б) Энергии и времени регистрации. в) Энергии и температуры.
г) Координаты и импульса. д) Импульса и массы.

В4. К точно решаемым задачам в квантовой механике относятся:

- а) Задача о частице в потенциальном ящике. б) Задача о перемещении точки в пространстве. в) Атом водорода. г) Молекулярный ион H_2^+ . д) Задача о жестком ротаторе.

В5. Полное орбитальное квантовое число L для двух эквивалентных p-электронов принимает значения:

- а) 3, 2, 1. б) 2, 1, 0. в) 1, 0, -1. г) 2, 1, 1. д) 4, 2, 0.

В6. Терм основного состояния атома углерода записывается в виде:

- а) 3P_1 . б) 3P_0 . в) 3D_1 . г) 3D_0 .

В7. Установите соответствие.**Гомоядерные двухатомные молекулы и их электронные конфигурации**

Молекулы	Характерные признаки
----------	----------------------

1. O ₂	А. $KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\pi 2p_x)^2(\pi 2p_y)^2$
2. N ₂	Б. $KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\pi 2p_x)^1(\pi 2p_y)^1$
3. B ₂	В. $KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\pi 2p_x)^2(\pi 2p_y)^2(\sigma 2p_z)^2$
4. C ₂	Г. $KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\sigma 2p_z)^2(\pi 2p_x)^2(\pi 2p_y)^2(\pi^* 2p_x)^1(\pi^* 2p_y)^1$

ЧАСТЬ С

Ответы к заданиям части С формулируете в свободной краткой форме и записываете в бланк ответов.

С1. В чем принципиальное отличие моделей, лежащих в основе квантово-механических теорий описания химической связи ММО и МВС?

С2. Какие квантово-механические методы расчетов называются полуэмпирическими? Приведите пример.

С3. Дайте определение атомной орбитали?

С4. Какой физический смысл имеет квадрат модуля волновой функции?

С5. Сущность приближения Борна-Оппенгеймера.

7 ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ

Информационные технологии – обучение в электронной образовательной среде с целью расширения доступа к образовательным ресурсам, увеличения контактного взаимодействия с преподавателем, построения индивидуальных траекторий подготовки, объективного контроля и мониторинга знаний студентов.

В образовательном процессе по дисциплине используются следующие информационные технологии, являющиеся компонентами Электронной информационно-образовательной среды БГПУ:

- Официальный сайт БГПУ;
- Система электронного обучения ФГБОУ ВО «БГПУ»;
- Система тестирования на основе единого портала «Интернет-тестирования в сфере образования www.i-exam.ru»;
- Система «Антиплагиат.ВУЗ»;
- Электронные библиотечные системы;
- Мультимедийное сопровождение лекций и практических занятий.

8 ОСОБЕННОСТИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ИНВАЛИДАМИ И ЛИЦАМИ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья применяются адаптивные образовательные технологии в соответствии с условиями, изложенными в разделе «Особенности реализации образовательной программы для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья» основной образовательной программы (использование специальных учебных пособий и дидактических материалов, специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования, предоставление услуг ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь и т. п.) с учётом индивидуальных особенностей обучающихся.

9 СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ

9.1 Литература

Основная литература

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для студ. вузов / В.И. Барановский. – М.: Академия, 2008. – 382 с. (14 экз.)
2. Шарутина, О.К. Задачи и упражнения по основам квантовой механики и квантовой химии: учебное пособие / О.К. Шарутина. – Благовещенск: изд-во БГПУ, 2010. – 203 с. (30 экз.)

Дополнительная литература

1. Грибов, Л. А. Квантовая химия: Учебник / Л.А Грибов, С.П. Муштакова. – М.: «Гардарики», 1999. – 390 с. (40 экз.)

9.2 Базы данных и информационно-справочные системы

1. Сайт о химии <http://www.xumuk.ru/>
2. Каталог образовательных интернет-ресурсов <http://www.edu.ru>
3. Популярная библиотека химических элементов
<https://web.archive.org/web/20161021151915/http://n-t.ru/ri/ps/>
4. Электронная библиотека по химии МГУ <http://www.chem.msu.su/rus/elibrary/>

9.3 Электронно-библиотечные ресурсы

1. Polpred.com Обзор СМИ/Справочник <http://polpred.com/news>.
2. ЭБС «Юрайт» <https://urait.ru/>.

10 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ БАЗА

Для проведения занятий лекционного и семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации используются аудитории, оснащённые учебной мебелью, аудиторной доской, компьютером(рами) с установленным лицензионным специализированным программным обеспечением, коммутатором для выхода в электронно-библиотечную систему и электронную информационно-образовательную среду БГПУ, мультимедийными проекторами, экспозиционными экранами, учебно-наглядными пособиями (карты, таблицы, мультимедийные презентации). Для проведения практических занятий также используется:

Ауд. 219 «А»

- Стол письменный 2-мест. (12 шт.)
- Стул (24 шт.)
- Стол преподавателя (1 шт.)
- Стул преподавателя (1 шт.)
- Пюпитр (1 шт.)
- Аудиторная доска (1 шт.)
- Компьютер с установленным лицензионным программным обеспечением (3 шт.)
- Мультимедийный проектор (1 шт.)
- Принтер лазерный (2 шт.)
- Экспозиционный экран (навесной) (1 шт.)
- ЯМР-спектрометр низкого разрешения «Спин Трэк» (1 шт.)
- Аквадистиллятор ДЭ-10 (1 шт.)
- Весы GF-300 (1 шт.)
- Весы торсионные ВТ-100 (1 шт.)
- Вискозиметр (4 шт.)
- Иономер (3 шт.)
- Кондуктометр анион-4120 (3 шт.)
- КФК-2 (1 шт.)
- Люксмер (1 шт.)
- Мешалка магнитная П-Э-6100 (2 шт.)
- Модуль «Термический анализ» (3 шт.)
- Модуль «Термостат» (3 шт.)
- Модуль «Универсальный контроллер» (3 шт.)
- Модуль «Электрохимия» (3 шт.)
- Модуль универсальный (6 шт.)
- Набор сит КП-131 (1 шт.)
- Поляриметр (1 шт.)
- Потенциометр (1 шт.)

- Центрифуга лабораторная ОПН-8 (с ротором) (1 шт.)
- Штатив для электродов (2 шт.)
- Эксикатор с краном (1 шт.)
- Модуль «Общелабораторный» (1 шт.)
- Спектрофотометр (1 шт.)
- Спектрофотометр КФК-3КМ (1 шт.)
- Комплект ариометров (1 шт.)
- Метроном (1 шт.)
- Мост реохордный с сосудом
- Термостат ТС-1/80 СПУ (1 шт.)
- Штативы для пробирок, нагревательные приборы
- Учебно-наглядные пособия - слайды, таблицы, мультимедийные презентации по дисциплине «Строение вещества и основы квантовой химии»

Самостоятельная работа студентов организуется в аудиториях оснащенных компьютерной техникой с выходом в электронную информационно-образовательную среду вуза, в специализированных лабораториях по дисциплине, а также в залах доступа в локальную сеть БГПУ, в лаборатории психолого-педагогических исследований и др.

Лицензионное программное обеспечение: операционные системы семейства Windows, Linux; офисные программы Microsoft office, Libreoffice, OpenOffice; Adobe Photoshop, Matlab, DrWeb antivirus и т.д.

Разработчик: Жидков В.В., кандидат химических наук, доцент кафедры химии.

11 ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ И ДОПОЛНЕНИЙ

Утверждение изменений в РПД для реализации в 2020/2021 уч. г.

РПД обсуждена и одобрена для реализации в 2020/2021 уч. г. на заседании кафедры химии (протокол № 9 от 11.06.2020 г.). В РПД внесены следующие изменения и дополнения:

№ изменения: 1 № страницы с изменением: титульный лист	
Исключить:	Включить:
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ	МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Утверждение изменений в РПД для реализации в 2021/2022 уч. г.

РПД обсуждена и одобрена для реализации в 2021/2022 уч. г. на заседании кафедры химии (протокол № 7 от 14.04.2021 г.).

Утверждение изменений и дополнений в РПД для реализации в 2022/2023 уч. г.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2022/2023 учебном году на заседании кафедры (протокол № 9 от 26 мая 2022 г.). В РПД внесены следующие изменения и дополнения:

№ изменения: 2 № страницы с изменением: 24	
В Раздел 9 внесены изменения в список литературы, в базы данных и информационно-справочные системы, в электронно-библиотечные ресурсы. Указаны ссылки, обеспечивающие доступ обучающимся к электронным учебным изданиям и электронным образовательным ресурсам с сайта ФГБОУ ВО «БГПУ».	