

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

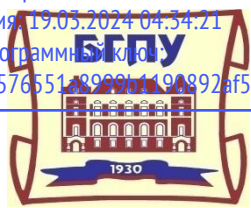
ФИО: Щёкина Вера Витальевна

Должность: Ректор

Дата подписания: 19.03.2024 04:34:21

Уникальный программный ключ:

a2232a55157e576551899911190892af53989120420736ffb573e474e57789




**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  
ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ХИМИЮ**

**Направление подготовки  
04.03.01 ХИМИЯ**

**Профиль  
«АНАЛИТИЧЕСКАЯ 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.....	4
3	СОДЕРЖАНИЕ ТЕМ (РАЗДЕЛОВ) .....	8
4	МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ (УКАЗАНИЯ) ДЛЯ СТУДЕНТОВ ПО ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ .....	11
5	ПРАКТИКУМ ПО ДИСЦИПЛИНЕ.....	13
6	ДИДАКТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ КОНТРОЛЯ (САМОКОНТРОЛЯ) УСВОЕННОГО МАТЕРИАЛА.....	18
7	ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ.....	34
8	ОСОБЕННОСТИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ИНВАЛИДАМИ И ЛИЦАМИ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ.....	34
9	СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ.....	35
10	МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ БАЗА.....	35
11	ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ И ДОПОЛНЕНИЙ.....	38

## 1 ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

**1.1 Цель дисциплины:** познакомить студентов с основными понятиями, методами и законами квантовой механики, 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 «Введение в квантовую химию» относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений блока Б1 (Б1.В.06).

**1.3 Дисциплина направлена на формирование следующих компетенций:** УК-1; ОПК-3; ПК-1:

- **УК-1.** Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач, **индикаторами** достижения которой является:

- УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие;
- УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи;
- УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов;
- УК-1.4. При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения, в том числе с применением философского понятийного аппарата.

• УК-1.5. Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки

- **ОПК-3** Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники, **индикаторами** достижения которой является:

- ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности
- ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности

- **ПК-1.** Владеет системой фундаментальных химических понятий и законов, **индикаторами** достижения которой является:

- ПК-1.1. Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования.
- ПК-1.2. Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности
- ПК-1.3. Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин

### 1.4 Перечень планируемых результатов обучения.

В результате изучения дисциплины студент должен:

– **Знать:**

- начала квантовой теории, примеры применения квантовой механики;
- основы информационных технологий, основные возможности и правила работы со стандартными программными продуктами при решении профессиональных задач;
- основные источники информации для решения задач профессиональной сферы деятельности;
- стандартные операции по предлагаемым методикам

– **Уметь:**

- анализировать задачу, выделяя ее базовые составляющие: 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;

- проводить первичный поиск информации для решения профессиональных задач;
- применять стандартное программное обеспечение при решении химических и материаловедческих задач, при подготовке научных публикаций и докладов;
- выбирать методы диагностики веществ и материалов, проводить стандартные измерения.

– **Владеть:**

- навыками при обработке информации отличать факты от мнений, интерпретаций, оценок, формировать собственные мнения и суждения, аргументировать свои выводы и точку зрения, в том числе с применением философского понятийного аппарата. навыками работы с научными и образовательными порталами;

- базовыми навыками применения стандартного программного обеспечения для обработки результатов исследований и представления их научному сообществу;

- навыками планирования, анализа.

**1.5 Общая трудоемкость дисциплины «Введение в квантовую химию» составляет 5 зачетных единицы (далее – ЗЕ) (180 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 деятельности**

<b>Вид учебной работы</b>	<b>Всего часов</b>	<b>Семестр 8</b>
Общая трудоемкость	180	180
Аудиторные занятия	86	86
Лекции	44	44
Лабораторные работы	42	42
Самостоятельная работа	58	58
Вид итогового контроля	36	36 экзамен

**2 УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ**

**Учебно-тематический план**

<b>№</b>	<b>Наименование тем (разделов)</b>	<b>Всего часов</b>	<b>Аудиторные занятия</b>		<b>Самостоятельная работа</b>
			<b>Лекции</b>	<b>Лабораторные занятия</b>	

1	2	3	4	5	6
<b>I</b>	<b>Введение. Основы квантовой механики</b>				
	<b>Начала квантовой теории.</b> Гипотеза Планка. Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Теория Н. Бора.	4	2		2
	<b>Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц.</b> Уравнение де Бройля. Принцип дополнительности. Принцип неопределенности. Уравнение Шредингера.	2	2		
	Лабораторная работа 1. Начала квантовой теории. Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц.	8		4	4
	<b>Постулаты квантовой механики</b> Математический аппарат квантовой механики. Операторы и их свойства. Операторы физических величин.	2	2		
	Лабораторная работа 2. Постулаты квантовой механики.	8		4	4
	<b>Частные случаи решения уравнения Шредингера.</b> Движение частицы в потенциальном ящике (одномерная и трехмерная задачи). Одномерный жесткий ротатор. Сферический ротатор. Гармонический осциллятор. Понятие о квантовых числах.	4	2		2
<b>II</b>	<b>Основы квантовой химии</b>				
	<b>Одноэлектронные атомы.</b> Уравнение Шредингера для атома водорода. Переход к сферическим координатам. Нахождение вида функций.	2	2		
	Лабораторная работа 3. Частные случаи решения уравнения Шредингера. Одноэлектронные атомы.	6		4	2
	<b>Контрольная работа № 1</b> <b>Тема: Постулаты квантовой химии</b>	2			2
	Система квантовых чисел. Атомная орбиталь. Графическое изображение радиальной и угловой частей волновой функции.	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.	2	2		
	<b>Многоэлектронные атомы.</b> Гамильтониан многоэлектронного атома. Нулевое приближение. Одноэлектронное приближение. Вариационный метод. Волновые функции Хартри. Метод самосогласованного поля	4	2		2
	Принцип Паули. Определители Слэтера. Метод Хартри-Фока. Атомные орбитали Слэтера.	2	2		

	Эффективное главное квантовое число и заряд. Константа экранирования. Потенциал ионизации. Средство к электрону.				
	<b>Контрольная работа № 2</b> <i>Тема: Водородоподобные и многоэлектронные атомы</i>	2			2
	Квантовые числа многоэлектронных атомов. Спин-орбитальное взаимодействие. Термы. Спектры. Атомы в магнитном и электрическом полях.	2	2		
	Лабораторная работа 4. Расчет средних величин. Многоэлектронные атомы. Квантовые числа многоэлектронных атомов.	8		4	4
<b>III</b>	<b>Теория химической связи</b>				
	Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод валентных связей. Расчет молекулы водорода. Уточнение расчетов.	2	2		
	Лабораторная работа 5. Теория химической связи. Метод молекулярных орбиталей.	8		4	4
	Метод молекулярных орбиталей. Общие положения. Приближение ЛКАО. Уравнения Рутаана. Выбор базисных атомных функций. Электронная корреляция.	2	2		
	Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Вековое уравнение, вековой определитель. Волновая функция и энергия основного состояния молекулы водорода.	2	2		
	Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул. Классификация МО. Электронные конфигурации молекул. Свойства основного состояния молекул.	2	2		
	Лабораторная работа 6. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул.	8		4	4
	Гетероядерные двухатомные и многоатомные молекулы.	2	2		
<b>IV</b>	<b>Расчетные методы квантовой химии</b>				
	Общая характеристика неэмпирических и полуэмпирических методов расчета.	2	2		
	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ). Основные положения.	2	2		
	Лабораторная работа 7. Гетероядерные двухатомные и многоатомные молекулы. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ).	8		4	4
	Расчет коэффициентов при атомных орбиталях в методе МОХ. Олефины. Полиены.	2	2		
	Лабораторная работа 8. Расчет коэффициентов	8		4	4

	при атомных орбиталях в методе МОХ.				
	Расчет электронной плотности, заряда, порядка связи, индекса свободной валентности.	2	2		
	Аннулены. Энергетические диаграммы МО. Энергетические критерии ароматичности.	2	2		
	Лабораторная работа 9. Расчет электронной плотности, заряда, порядка связи, индекса свободной валентности. Альтернантные и неальтернантные углеводороды.	8		4	4
	Применение метода Хюккеля при корреляции физических свойств сопряженных систем.	2	2		
	Лабораторная работа 10. Применение метода Хюккеля при корреляции физических свойств сопряженных систем.	6		4	2
	Расчет реакционной способности $\pi$ -электронных систем. Электрофильное, нуклеофильное, радикальное замещение.	2	2		
	Лабораторная работа 11. Расчет реакционной способности $\pi$ -электронных систем.	4		2	2
	<b>Контрольная работа № 3</b> <b>Тема: Расчеты в рамках метода МО</b>	2			2
	Экзамен	36			
	<b>ИТОГО</b>	<b>180</b>	<b>44</b>	<b>42</b>	<b>58</b>

### Интерактивное обучение по дисциплине

№	Наименование тем (разделов)	Вид занятия	Форма интерактивного занятия	Кол-во часов
1.	Математический аппарат квантовой механики. Операторы и их свойства. Операторы физических величин.	ЛК	Лекция-дискуссия	2
2.	Лабораторная работа 4. Расчет средних величин. Многоэлектронные атомы. Квантовые числа многоэлектронных атомов.	ЛБ	Разбор конкретных ситуаций	4
3.	Лабораторная работа 5. Теория химической связи. Метод молекулярных орбиталей.	ЛБ	Разбор конкретных ситуаций	4
4.	Метод молекулярных орбиталей. Общие положения. Приближение ЛКАО. Уравнения Рутаана. Выбор базисных атомных функций. Электронная корреляция.	ЛК	Лекция-консультация	2
5.	Лабораторная работа 6. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул.	ЛБ	Работа в малых группах	4
6	Лабораторная работа 7. Гетероядерные двухатомные и многоатомные молекулы. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ).	ЛБ	Работа в малых группах	4

7.	Лабораторная работа 8. Расчет коэффициентов при атомных орбиталях в методе МОХ.	ЛБ	Работа в малых группах	4
8.	Аннулены. Энергетические диаграммы МО. Энергетические критерии ароматичности.	ЛК	Лекция-консультация	2
9.	Применение метода Хюккеля при корреляции физических свойств сопряженных систем.	ЛК	Лекция-консультация	2
	<b>ИТОГО</b>			<b>28</b>

### 3 СОДЕРЖАНИЕ ТЕМ (РАЗДЕЛОВ)

#### I ВВЕДЕНИЕ. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

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

*Начала квантовой теории.* Основные этапы развития квантовой теории. Макромир. Описание в рамках классической механики и электродинамики. Волновая теория электромагнитного излучения. Излучение абсолютно черного тела. Гипотеза Планка. Уравнение, постоянная Планка, ее физический смысл.

*Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц.* 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.

*Постулаты 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.



## II ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

### *Одноэлектронные атомы*

Уравнение 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.

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.

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.* Среднее и 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.* Гамильтониан многоэлектронного атома.

Уравнение Шредингера для многоэлектронных атомов.

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.

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

## III 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* Хюккеля (МОХ). Основные положения метода. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей. Правила составления линейных комбинаций атомных орбиталей.

Расчет коэффициентов при атомных орбиталях в методе МОХ. Олефины. Полиены.

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

*Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО.* Кулоновский, обменный интегралы, интегралы перекрывания. Вековое уравнение и вековой определитель. Молекулярные орбитали и энергетические уровни. Основное и возбужденные состояния. Молекулярные термы.

*Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул.* Классификация молекулярных орбиталей по симметрии.  $\sigma$ - и  $\pi$ -Орбитали. Связывающие, разрыхляющие, несвязывающие орбитали. Энергетические диаграммы молекулярных орбиталей.

*Гетероядерные двухатомные и многоатомные молекул.*

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

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

#### **IV РАСЧЕТНЫЕ МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

*Общая характеристика неэмпирических методов расчета.* Полуэмпирические методы расчета молекул.

*Метод молекулярных орбиталей Хюккеля.* Основные положения и допущения. Применение к молекулам с сопряженными связями.

*Расчет коэффициентов при атомных орбиталях в методе МОХ.* Олефины. Полиены.

*Расчет электронной плотности, заряда, порядка связи, индекса свободной валентности.*

*Аннулены. Энергетические диаграммы МО.* Энергетические критерии ароматичности. Расчет физических свойств сопряженных соединений (потенциалы ионизации и сродство к электрону, электронные спектры поглощения). Индексы реакционной способности  $\pi$ -сопряженных молекул. Аннулены и полиены.

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 энергии резонанса.

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

*Расчет* Приближение изолированной и реагирующей молекулы. Электрофильное, нуклеофильное, радикальное замещение.

#### **СПИСОК 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.)

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

Программа призвана помочь студентам, обучающимся по направлению 04.03.01 «Химия», в организации самостоятельной работы по освоению дисциплины «Введение в квантовую химию».

Дисциплина «Введение в квантовую химию» изучается в 8 семестре на 4 курсе. Она представляет собой начальное введение в основной раздел современной теоретической химии, без знания которого работать в химии невозможно, как невозможно в настоящее время работать в естественных науках без знания математики.

Целью первого раздела дисциплины «Введение в квантовую химию» является последовательное изложение нерелятивистской квантовой теории на основе небольшого числа постулатов. При этом отобран минимальный объем сведений, необходимый для правильного понимания современной квантовой химии. Этот раздел дисциплины предполагает знание студентами классической механики и классической электродинамики. Квантовая механика 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.

Целью второго раздела дисциплины является изложение основ квантовой химии – раздела теоретической химии, в котором 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. «Введение в квантовую химию» 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 квантовой химии;
- Освоение неэмпирических и полуэмпирических методов изучения электронного строения атомов и молекул, качественной теории реакционной способности.

В результате изучения дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» студенты должны:

Знать:

- Основные постулаты квантовой механики;
- Способы описания состояний микросистем;
- Способы описания физических величин;
- Свойства собственных функций операторов физических величин;
- Явный вид операторов основных физических величин;
- Физическую интерпретации соотношений неопределенностей и волновых функций;
- Основные положения квантовой химии.

Уметь:

- Применять соотношения неопределенностей для получения оценок при

решении задач;

- Писать оператор Гамильтона для любой микросистемы;
- Писать уравнение Шрёдингера для атомов и молекул;
- Применять в простых случаях приближенные методы решения

уравнений Шрёдингера;

- Решать одномерные задачи на отыскание собственных функций и собственных значений;

Быть ознакомленными:

- С приближенными методами построения уравнений движения сложных атомных и молекулярных систем;

- Методами нахождения координатных и спиновых волновых функций;

- Методами построения матричных элементов оператора момента количества движения и его проекций;

- Неэмпирическими и полуэмпирическими методами изучения электронного строения атомов и молекул;

- Методами адиабатического и самосогласованного приближения.

Лекции охватывают все темы, выносимые на экзамен, и создают основу для изучения теоретического материала. Материал лекций и прочитанное в учебниках закрепляется на лабораторных работах, при написании тестов, контрольных и проверочных работ и анализе ошибок. Каждый студент должен добывать часть знаний самостоятельно: подбирать примеры из учебников, пособий и монографий для подтверждения тех или иных положений, выводить математические уравнения, решать задачи.

Помимо текстового материалов содержится ряд вспомогательных материалов в виде схем, рисунков, таблиц, диаграмм. Эти материалы, демонстрируемые на лекциях, порой трудно полностью и качественно записать в конспект. Воспользовавшись учебно-методическим комплексом, можно дополнить конспекты, а на лекции сосредоточиться на обсуждаемом материале.

Рабочей программой дисциплины «Введение в квантовую химию» предусмотрена самостоятельная работа студентов в объеме 58 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 лабораторным 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 «Введение в квантовую химию». 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 курса.

#### **Рекомендации по работе с литературой:**

При изучении дисциплины особое внимание следует обратить на рекомендуемые программой учебники и учебные пособия, методические разработки лабораторных занятий, а также на справочную литературу, приводимую в списках литературы.

### **Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине**

<b>№</b>	<b>Наименование раздела (темы) дисциплины</b>	<b>Формы/виды самостоятельной работы</b>	<b>Количество часов, в соответствии с учебно-тематическим планом</b>
I	Введение. Основы квантовой механики	Изучение основной литературы Изучение дополнительной литературы Оформление лабораторной работы Подготовка отчета по лабораторной работе Подготовка к контрольной работе Подготовка к экзамену	12
II	Основы квантовой химии	Изучение основной литературы Изучение дополнительной литературы Оформление лабораторной работы Подготовка отчета по лабораторной работе Подготовка к контрольной работе Подготовка к экзамену	14
III	Теория химической связи.	Изучение основной литературы Изучение дополнительной литературы Оформление лабораторной работы Подготовка отчета по лабораторной работе Подготовка к ответам по тесту Подготовка к контрольной работе Подготовка к экзамену	8
IV	Расчетные методы квантовой химии.	Изучение основной литературы Изучение дополнительной литературы Оформление лабораторной работы Подготовка отчета по лабораторной работе Подготовка к ответам по тесту Подготовка к контрольной работе Подготовка к экзамену	18
<b>ИТОГО</b>			<b>58</b>

## 5 ПРАКТИКУМ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

План лабораторных занятий

<b>№ п/п</b>	<b>Тема занятия</b>	<b>Тема лабораторной работы</b>	<b>Всего часов</b>
--------------	---------------------	---------------------------------	--------------------

I	Введение. Основы квантовой механики	Начала квантовой теории. Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц.	4
		Постулаты квантовой механики.	4
II	Основы квантовой химии	Частные случаи решения уравнения Шредингера. Одноэлектронные атомы.	4
		Расчет средних величин. Многоэлектронные атомы. Квантовые числа многоэлектронных атомов.	4
III	Теория химической связи	Теория химической связи. Метод молекулярных орбиталей.	4
		Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул.	4
IV	Расчетные методы квантовой химии	Гетероядерные двухатомные и многоатомные молекулы. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ).	4
		Расчет коэффициентов при атомных орбиталях в методе МОХ.	4
		Расчет электронной плотности, заряда, порядка связи, индекса свободной валентности. Альтернантные и неальтернантные углеводороды.	4
		Применение метода Хюккеля при корреляции физических свойств сопряженных систем.	4
		Расчет реакционной способности $\pi$ -электронных систем.	2
<b>ИТОГО</b>			<b>42</b>

### Лабораторный практикум

№	Темы	Литература	Вид занятий
1	Лабораторная работа 1. Начала квантовой теории. Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц.	[1] с. 4.	Лабораторная работа
2	Лабораторная работа 2. Постулаты квантовой механики.	[1] с. 30.	Лабораторная работа
3	Лабораторная работа 3. Частные случаи решения уравнения Шредингера. Одноэлектронные атомы.	[1] с. 32.	Лабораторная работа
4	Лабораторная работа 4. Расчет средних величин. Многоэлектронные	[1] с. 32.	Лабораторная работа

	атомы. Квантовые числа многэлектронных атомов.		
5	Лабораторная работа 5. Теория химической связи. Метод молекулярных орбиталей.	[1] с. 64.	Лабораторная работа
6	Лабораторная работа 6. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул.	[1] с. 88.	Лабораторная работа
7	Лабораторная работа 7. Гетероядерные двухатомные и многоатомные молекулы. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ).	[1] с. 92.	Лабораторная работа
8	Лабораторная работа 8. Расчет коэффициентов при атомных орбиталях в методе МОХ.	[1] с. 100.	Лабораторная работа
9	Лабораторная работа 9. Расчет электронной плотности, заряда, порядка связи, индекса свободной валентности. Альтернантные и неальтернантные углеводороды.	[1] с. 128.	Лабораторная работа
10	Лабораторная работа 10. Применение метода Хюккеля при корреляции физических свойств сопряженных систем.	[1] с. 120.	Лабораторная работа
11	Лабораторная работа 11. Расчет реакционной способности $\pi$ -электронных систем.	[1] с. 154.	Лабораторная работа

[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.

#### ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 1 (4 часа)

### НАЧАЛА КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ. КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ МИКРОЧАСТИЦ

#### Вопросы к лабораторному занятию:

1. Введение в квантовую теорию. Электромагнитное излучение
2. Излучение абсолютно черного тела
3. Теория Бора
4. Матричная механика Гейзенберга
5. Гипотеза де Бройля и волновая механика Шредингера

#### ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 2 (4 часа) ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

#### Вопросы к лабораторному занятию:

1. Основные понятия и постулаты квантовой механики
2. Простейшие одномерные задачи
3. Математический аппарат квантовой механики
4. Матричное представление операторов
5. Одномерное движение. Задача о гармоническом осцилляторе
6. Центральное поле и момент количества электричества

7. Движение частицы в центральном поле
8. Теория момента количества электричества
9. Атом водорода
10. Внешнее электромагнитное поле
11. Спин

**ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 3 (4 часа)**  
**ЧАСТНЫЕ СЛУЧАИ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА.**  
**ОДНОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ.**

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Уравнение Шредингера
2. Точные решения уравнения Шредингера
3. Приближенные решения уравнения Шредингера
4. Теория групп
5. Электронные состояния атомов
6. Волновое уравнение для многоэлектронных атомов

**ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 4 (4 часа)**  
**РАСЧЕТ СРЕДНИХ ВЕЛИЧИН. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ. КВАНТОВЫЕ**  
**ЧИСЛА МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ**

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Орбитали атома гелия
2. Возбужденное состояние атома He. Полная волновая функция, включающая спин
3. Электронные состояния многоэлектронных атомов
4. Электронные состояния и теория возмущений

**ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 5 (4 часа)**  
**ТЕОРИЯ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ. МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ**

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Электронные состояния молекул. Молекула водорода
2. Электронные и ядерные состояния молекул. Приближение Борна–Оппенгеймера
3. Метод Гайтлера–Лондона. Теория валентных связей
4. Метод молекулярных орбиталей и расчет молекулы водорода
5. Электронная корреляция
6. Вариационный метод и теорема вириала
7. Связь электронных и ядерных состояний

**ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 6 (4 часа)**  
**РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА ПО МЕТОДУ МО ЛКАО. МОЛЕКУЛЯРНЫЕ**  
**ОРБИТАЛИ ГОМОЯДЕРНЫХ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ**

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Вводные математические сведения
2. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО)
3. Приближение невзаимодействующих электронов
4. Элементы симметрии многоатомных молекул
5. Симметризованные ЛКАО. Гибридизация
6. Метод наложения конфигураций
7. Спиновые вырождения. Мультиплеты
8. Метод самосогласованного поля
9. Приближенные выражения для матричных элементов оператора Хартри-Фока. Возможность построения полуэмпирической теории электронных оболочек

**ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 7 (4 часа)**



ГЕТЕРОЯДЕРНЫЕ ДВУХАТОМНЫЕ И МНОГОАТОМНЫЕ МОЛЕКУЛЫ. МЕТОД  
МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ ХЮККЕЛЯ (МОХ)

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Качественное рассмотрение гомоядерных двухатомных молекул
2. Связывающие и разрыхляющие молекулярные орбитали
3. Электронные конфигурации
4. Символы молекулярных термов
5. Электронное строение многоатомных молекул
6. Неэмпирические расчеты
7. Методы, включающие дополнительные приближения
8. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 8 (4 часа).

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПРИ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЯХ В МЕТОДЕ МОХ

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Коэффициенты ЛКАО в векторной и матричной формах
2. Интерпретация волновых функций в форме ЛКАО
3. Матрица плотности первого порядка
4. Хартри-фоковские расчеты молекул
5. Интенсивности электронных спектральных переходов молекул

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 9 (4 часа).

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ, ЗАРЯДА, ПОРЯДКА СВЯЗИ, ИНДЕКСА  
СВОБОДНОЙ ВАЛЕНТНОСТИ. АЛЬТЕРНАНТНЫЕ И НЕАЛЬТЕРНАНТНЫЕ  
УГЛЕВОДОРОДЫ

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Вычисление геометрии органических соединений
2. Расчет потенциалов ионизации
3. Расчет индексов реакционной способности
4. Вычисление теплот образования
5. Расчет тепловых эффектов органических реакций
6. Расчет поверхностей потенциальной энергии и переходных состояний
7. Расчеты для систем с водородными связями

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 10 (4 часа).

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ХЮККЕЛЯ ПРИ КОРРЕЛЯЦИИ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
СОПРЯЖЕННЫХ СИСТЕМ

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Принципы качественной теории молекулярных орбиталей
2. Взаимодействие двух орбиталей
3. Взаимодействие нескольких орбиталей фрагментов
4. Построение орбиталей сложных молекул
  - 4.1. Орбитали связей и групп
  - 4.2. Молекулярные орбитали этилена и иона метония
  - 4.3. Орбитали циклических систем
  - 4.4. Орбитали металлоорганических фрагментов. Изоглобальная аналогия
  - 4.5. Полиэдрические органические молекулы и ионы
5. Устойчивость полиэдрических структур и правила счета скелетных и валентных электронов

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 11 (2 часа).

РАСЧЕТ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ  $\pi$ -ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Индексы реакционной способности  $\pi$ -сопряженных молекул

2. Общие ограничения
3. Приближение изолированной и реагирующей молекулы
4. Электрофильное замещение
5. Нуклеофильное замещение
6. Реакции радикального замещения
7. Реакции присоединения
8. Бензол, циклопропенон, триазин, порфин

## 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
УК-1	Отчет по лабораторной работе, устный ответ на лабораторном занятии	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	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
УК-1	Тест	Низкий – неудовлетворительно	Количество правильных ответов на вопросы теста менее 60 %
		Пороговый – удовлетворительно	Количество правильных ответов на вопросы теста от 61-75 %
		Базовый – хорошо	Количество правильных ответов на вопросы теста от 76-84 %
		Высокий – отлично	Количество правильных ответов на вопросы теста от 85-100 %
ОПК-3	Отчет по лабораторной работе, устный ответ на лабораторном занятии	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).
ОПК-3	Контрольная работа	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
ОПК-3	Тест	Низкий – неудовлетворительно	Количество правильных ответов на вопросы теста менее 60 %
		Пороговый – удовлетворительно	Количество правильных ответов на вопросы теста от 61-75 %
		Базовый – хорошо	Количество правильных ответов на вопросы теста от 76-84 %
		Высокий – отлично	Количество правильных ответов на вопросы теста от 85-100 %
ПК-1	Отчет по лабораторной работе, устный ответ на лабораторном занятии	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).
ПК-1	Контрольная работа	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-1	Тест	Низкий – неудовлетворитель	Количество правильных ответов на вопросы теста менее 60 %

		но	
		Пороговый – удовлетворительно	Количество правильных ответов на вопросы теста от 61-75 %
		Базовый – хорошо	Количество правильных ответов на вопросы теста от 76-84 %
		Высокий – отлично	Количество правильных ответов на вопросы теста от 85-100 %

## 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 экзамен.

Для оценивания результатов освоения дисциплины применяется следующие критерии оценивания.

### Критерии оценивания устного ответа на экзамене

**Оценка «5» (отлично)** ставится, если студент:

1. полно раскрыто содержание материала билета;
2. материал изложен грамотно, в определенной логической последовательности, точно используется терминология;
3. показано умение иллюстрировать теоретические положения конкретными примерами, применять их в новой ситуации;
4. продемонстрировано усвоение ранее изученных сопутствующих вопросов, сформированность и устойчивость компетенций, умений и навыков;
5. ответ прозвучал самостоятельно, без наводящих вопросов;
6. допущены одна – две неточности при освещении второстепенных вопросов, которые исправляются по замечанию.

**Оценка «4» (хорошо)** ставится, если:

ответ студента удовлетворяет в основном требованиям на оценку «5», но при этом имеет один из недостатков:

1. в изложении допущены небольшие пробелы, не исказившие содержание ответа;
2. допущены один – два недочета при освещении основного содержания ответа, исправленные по замечанию экзаменатора;
3. допущены ошибка или более двух недочетов при освещении второстепенных вопросов, которые легко исправляются по замечанию экзаменатора.

**Оценка «3» (удовлетворительно)** ставится, если:

1. неполно или непоследовательно раскрыто содержание материала, но показано общее понимание вопроса и продемонстрированы умения, достаточные для дальнейшего усвоения материала;
2. имелись затруднения или допущены ошибки в определении понятий, использовании терминологии, исправленные после нескольких наводящих вопросов;
3. при неполном знании теоретического материала выявлена недостаточная сформированность компетенций, умений и навыков, студент не может применить теорию в новой ситуации.

**Оценка «2» (неудовлетворительно)** ставится, 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, при использовании терминологии, которые не исправлены после нескольких наводящих вопросов.

4. не сформированы компетенции, умения и навыки.

## ТРЕБОВАНИЯ К ФОРМЕ ОТЧЕТА ПО ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ

**Форма отчета.** Отчет должен содержать название, цель работы, описание хода работы, расчеты, таблицу, вывод. К лабораторной работе должны быть разобраны вопросы к занятию. **Лабораторная работа 1.** Начала квантовой теории. Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц.

### **Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Введение в квантовую теорию. Электромагнитное излучение
2. Излучение абсолютно черного тела
3. Теория Бора
4. Матричная механика Гейзенберга
5. Гипотеза де Бройля и волновая механика Шредингера

**Лабораторная работа 2.** Постулаты квантовой механики.

### **Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Основные понятия и постулаты квантовой механики
2. Простейшие одномерные задачи
3. Математический аппарат квантовой механики
4. Матричное представление операторов
5. Одномерное движение. Задача о гармоническом осцилляторе
6. Центральное поле и момент количества электричества
7. Движение частицы в центральном поле
8. Теория момента количества электричества
9. Атом водорода
10. Внешнее электромагнитное поле
11. Спин

**Лабораторная работа 3.** Частные случаи решения уравнения Шредингера. Одноэлектронные атомы.

### **Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Уравнение Шредингера
2. Точные решения уравнения Шредингера
3. Приближенные решения уравнения Шредингера
4. Теория групп
5. Электронные состояния атомов
6. Волновое уравнение для многоэлектронных атомов

**Лабораторная работа 4.** Расчет средних величин. Многоэлектронные атомы. Квантовые числа многоэлектронных атомов.

### **Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Орбитали атома гелия
2. Возбужденное состояние атома He. Полная волновая функция, включающая спин
3. Электронные состояния многоэлектронных атомов
4. Электронные состояния и теория возмущений

**Лабораторная работа 5.** Теория химической связи. Метод молекулярных орбиталей.

### **Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Электронные состояния молекул. Молекула водорода
2. Электронные и ядерные состояния молекул. Приближение Борна–Оппенгеймера
3. Метод Гайтлера–Лондона. Теория валентных связей

4. Метод молекулярных орбиталей и расчет молекулы водорода
5. Электронная корреляция
6. Вариационный метод и теорема вириала
7. Связь электронных и ядерных состояний

**Лабораторная работа 6.** Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул.

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Вводные математические сведения
2. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО)
3. Приближение невзаимодействующих электронов
4. Элементы симметрии многоатомных молекул
5. Симметризованные ЛКАО. Гибридизация
6. Метод наложения конфигураций
7. Спиновые вырождения. Мультиплеты
8. Метод самосогласованного поля
9. Приближенные выражения для матричных элементов оператора Хартри-Фока.

Возможность построения полуэмпирической теории электронных оболочек

**Лабораторная работа 7.** Гетероядерные двухатомные и многоатомные молекулы. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ).

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Качественное рассмотрение гомоядерных двухатомных молекул
2. Связывающие и разрыхляющие молекулярные орбитали
3. Электронные конфигурации
4. Символы молекулярных термов
5. Электронное строение многоатомных молекул
6. Неэмпирические расчеты.....234
7. Методы, включающие дополнительные приближения ..... 236
8. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля.....239

**Лабораторная работа 8.** Расчет коэффициентов при атомных орбиталях в методе МОХ.

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Коэффициенты ЛКАО в векторной и матричной формах
2. Интерпретация волновых функций в форме ЛКАО
3. Матрица плотности первого порядка
4. Хартри-фоковские расчеты молекул
5. Интенсивности электронных спектральных переходов молекул

**Лабораторная работа 9.** Расчет электронной плотности, заряда, порядка связи, индекса свободной валентности. Альтернантные и неальтернантные углеводороды.

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Вычисление геометрии органических соединений
2. Расчет потенциалов ионизации
3. Расчет индексов реакционной способности
4. Вычисление теплот образования
5. Расчет тепловых эффектов органических реакций
6. Расчет поверхностей потенциальной энергии и переходных состояний
7. Расчеты для систем с водородными связями

**Лабораторная работа 10.** Применение метода Хюккеля при корреляции физических свойств сопряженных систем.

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Принципы качественной теории молекулярных орбиталей



2. Взаимодействие двух орбиталей
3. Взаимодействие нескольких орбиталей фрагментов
4. Построение орбиталей сложных молекул
  - 4.1. Орбитали связей и групп
  - 4.2. Молекулярные орбитали этилена и иона метония
  - 4.3. Орбитали циклических систем
  - 4.4. Орбитали металлоорганических фрагментов. Изоглобальная аналогия
  - 4.5. Полиэдрические органические молекулы и ионы
5. Устойчивость полиэдрических структур и правила счета скелетных и валентных электронов

**Лабораторная работа 11.** Расчет реакционной способности  $\pi$ -электронных систем.

**Вопросы к лабораторному занятию:**

1. Индексы реакционной способности  $\pi$ -сопряженных молекул
2. Общие ограничения
3. Приближение изолированной и реагирующей молекулы
4. Электрофильное замещение
5. Нуклеофильное замещение
6. Реакции радикального замещения
7. Реакции присоединения
8. Бензол, циклопропенон, триазин, порфин

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

## КОМПЛЕКТ ЗАДАНИЙ ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ

### Контрольная работа № 1

**Тема:** *Постулаты 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  $T = 300$  К? ( $k$  – постоянная Больцмана  $1.381 \cdot 10^{-23}$  Дж·К<sup>-1</sup>).
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  $2.14 \cdot 10^7$  м·с<sup>-1</sup>. Как прочно был связан электрон в атоме?

### Контрольная работа № 2

**Тема:** *Водородоподобные и многоэлектронные атомы*

#### Вариант 1

1. Запишите обозначения термов для конфигураций: а) основного состояния атомов Na и F; б) возбужденного состояния атома углерода  $1s^2 2s^2 2p^1 3p^1$ .
2. Найдите значения квантового числа полного орбитального момента импульса, возникающего из комбинации орбитальных моментов трех  $d$ -электронов.
3. Какие значения  $J$  могут быть обусловлены следующими термами:  $^1S, ^2P, ^3P, ^3D, ^4D$ ? Сколько состояний, различающихся по  $M_J$ , может быть на каждом уровне?
4. Изобразите расположение электронов в атоме серы для терма  $^1D_2$ .

5. Рассчитайте по правилам Слэтера первый потенциал ионизации атома кислорода. Ответ выразите в эВ.

6. Для  $2s$ -состояния водородоподобного атома рассчитайте среднее значение  $\langle r^2 \rangle$ .

### Контрольная работа № 3

**Тема:** *Расчеты в рамках метода МО*

#### Вариант 1

1. Сколько узлов имеется в несвязывающей МО аллильного радикала ( $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2\cdot$ ), рассчитанной методом молекулярных орбиталей Хюккеля. Дайте обоснованный ответ.

2. Каково число вакантных МО в расчете молекулы нафталина методом молекулярных орбиталей Хюккеля? Ответ обоснуйте.

3. Постройте молекулярную диаграмму для молекулы этилена с указанием полного порядка связи, электронных зарядов на атомах, индексов свободной валентности.

4. Каково число атомных орбиталей, используемых в расчете методом Хюккеля молекулы толуола ( $\text{C}_6\text{H}_5-\text{CH}_3$ )?

### ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ

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 фотонов. 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.

5. Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц. Гипотеза Луи де Бройля о двойственной природе материи. Экспериментальные доказательства волновых свойств микрочастиц. Волны де Бройля.

6. Принцип дополнительности Бора. Принцип неопределенности Гейзенберга. Примеры действия принципа неопределенности. Следствие принципа неопределенности. Классическая и квантовая механики и соотношение между ними.

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

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

9. Постулаты квантовой механики.

10. 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 масс. 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.  $\sigma$ -,  $\pi$ -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  $\pi$ -связей ( $\text{BeH}_2$ ) и с  $\pi$ -связями ( $\text{BeF}_2$ ). Энергетические диаграммы МО.
44. Молекулярные орбитали полиядерных молекул. Угловые ( $\text{H}_2\text{O}$ ) и тетраэдрические молекулы ( $\text{CH}_4$ ).
45. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета молекул.  $\sigma$ -,  $\pi$ -Приближение. Полуэмпирический метод молекулярных орбиталей Хюккеля.
46. Расчет энергий молекулярных орбиталей в методе МОХ. Аннулены. Система циклопропена. 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 квантовомеханических 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  $\pi$ -сопряженных молекул. Приближение изолированной и реагирующей молекулы. Электрофильное, нуклеофильное, радикальное замещение.

## ПРИМЕРЫ ТЕСТОВЫХ ЗАДАНИЙ

### 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  $^{12}\text{C}$
  - 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) $Af = f^3$

### 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

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

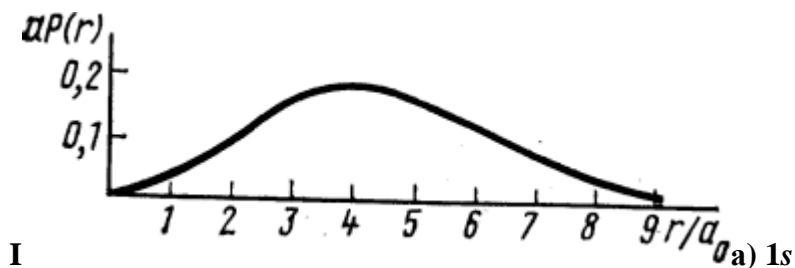
г)  $\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N E_i$  – полная энергия системы  
 д)  $E_i = E_j$  для любых  $i, j$

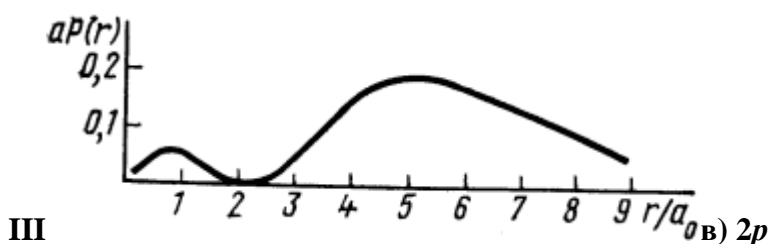
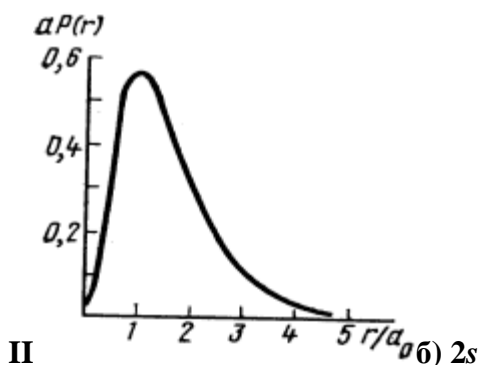
□

## 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)  $H$  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  $\Psi(r, \theta, \phi)$  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)  $n, l$ ; б)  $l, m_l$ ; в)  $m_l, m_s$ .
6. Энергия электрона в атоме гелия определяется значением квантового числа (значениями квантовых чисел): а)  $n, l$ ; б)  $l, m_l$ ; в)  $m_l, m_s$ .
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

#### 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.

**А1. 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.

**А2. 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.

**А3. Для каких многоатомных молекул можно использовать метод МО Хюккеля?**

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

**А4. Атомная орбиталь характеризуется набором квантовых чисел:**

- а) 3. б) 4. в) 2. г) 5.

**А5. Главное квантовое число  $n$  определяет:**

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

**А6. Атомный терм характеризует:**

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

**А7. 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, спинового 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.

**B1. Зная вид волновой функции, можно рассчитать:**

а) Распределение электронной плотности. б) Потенциал ионизации.

в) Среднее значение некоторой физической величины. г) Заряд ядра.

**B2. Волновая функция должна удовлетворять следующим условиям:**

а) Неоднозначность. б) Конечность. в) Непрерывность. г) Условие нормировки.

д) Зависимость только от одной переменной.

**B3. 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.

**B4. 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.

**B5. 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.

**B6. Терм основного состояния атома углерода записывается в виде:**

а)  $^3P_1$ . б)  $^3P_0$ . в)  $^3D_1$ . г)  $^3D_0$ .

**B7. Установите соответствие.**

**Гомоядерные двухатомные молекулы и их электронные конфигурации**

Молекулы	Характерные признаки
1. O <sub>2</sub>	А. $KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\pi 2p_x)^2(\pi 2p_y)^2$
2. N <sub>2</sub>	Б. $KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\pi 2p_x)^1(\pi 2p_y)^1$
3. B <sub>2</sub>	В. $KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\pi 2p_x)^2(\pi 2p_y)^2(\sigma 2p_z)^2$
4. C <sub>2</sub>	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 полупирическими? Приведите пример.

**С3.** Дайте определение атомной орбитали?

**С4.** Какой физический смысл имеет квадрат модуля волновой функции?

**С5.** Сущность приближения Борна-Оппенгеймера.

#### **6.11 Вопросы к государственному экзамену**

1. Корпускулярно-волновой дуализм излучения и микрочастиц. Начала квантовой теории. Принцип неопределенности Гейзенберга как фундаментальный закон природы. Уравнение Шредингера. Волновая функция, ее свойства.

2. Квантомеханическая теория строения атомов. Атомная орбиталь. Квантовые числа. Энергетические уровни многоэлектронных атомов. Термы.

3. Ковалентная связь. Свойства ковалентной связи. Метод валентных связей. Физическая идея метода. Достоинства и недостатки метода ВС.

4. Метод молекулярных орбиталей. Физическая идея метода. Приближение МО ЛКАО. Классификация молекулярных орбиталей. Энергетические диаграммы молекулярных орбиталей. Электронные конфигурации молекул. Гомонуклеарные и гетеронуклеарные двухатомные молекулы. Достоинства метода МО при объяснении свойств молекул.

### **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](http://www.i-exam.ru)»;
- Система «Антиплагиат.ВУЗ»;
- Электронные библиотечные системы;
- Мультимедийное сопровождение лекций.

### **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.

Для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья предусмотрены следующие формы организации педагогического процесса и контроля знаний:

- для слабовидящих:

обеспечивается индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс;

для выполнения контрольных заданий при необходимости предоставляется увеличивающее устройство;

задания для выполнения, а также инструкции о порядке выполнения контрольных заданий оформляются увеличенным шрифтом (размер 16-20);

- для глухих и слабослышащих:

обеспечивается наличие звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования, при необходимости обучающимся предоставляется звукоусиливающая аппаратура индивидуального пользования;

- для лиц с тяжелыми нарушениями речи, глухих, слабослышащих все контрольные задания по желанию могут проводиться в письменной форме.

Основной формой организации педагогического процесса является интегрированное обучение инвалидов, т.е. все обучающиеся учатся в смешанных группах, имеют возможность постоянно общаться со сверстниками, легче адаптируются в социуме.

## 9 СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ

### Литература

#### 9.1 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. – 202 с. (30 экз.)

#### 9.2 Дополнительная литература

1. Грибов, Л. А. Квантовая химия: Учебник / Л.А Грибов, С.П. Муштакова. – М.: «Гардарики», 1999. – 389 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. Электронная библиотека по химии <http://www.chem.msu.su/rus/elibrary/>

#### 9.3 Электронно-библиотечные ресурсы

1. Polpred.com Обзор СМИ/Справочник <https://polpred.com/news>

2. ЭБС «Юрайт» <https://urait.ru>

## 10 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ БАЗА

Для проведения занятий лекционного 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 (таблицы, мультимедийные презентации). Для проведения лабораторных занятий также используется:

### Ауд. 219 «А». Лаборатория химической технологии

- Стол лабораторный 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 специализированным программным обеспечением (3 шт.)
- 8 - портовый коммутатор D-Link для выхода в электронно-библиотечную систему и электронную информационно-образовательную среду БГПУ (1 шт.)
- Мультимедийный проектор SHARP -10 X (1 шт.)
- Принтер лазерный «CANON» (2 шт.)
- Экспозиционный экран (навесной) (1 шт.)
- ЯМР-спектрометр низкого разрешения «Спин Трэк» (1 шт.)
- Весы GF-300 (1 шт.)
- Весы торсионные BT-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)
- Учебно-наглядные пособия - слайды, таблицы, мультимедийные презентации по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия»
- Штативы для пробирок, нагревательные приборы, лабораторная посуда

Химические реактивы по тематике лабораторных работ

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 и дополнений 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» июня 2020 г.). В РПД внесены следующие изменения и дополнения:

В рабочую программу внесены следующие изменения и дополнения:

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

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

РПД пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2021/2022 учебном году на заседании кафедры химии (протокол № 7 от 14 апреля 2021 г.).

В рабочую программу внесены следующие изменения и дополнения:

№ изменения: 2	
№ страницы с изменением: 35	
Исключить:	Включить:
	В пункт 9.3: ЭБС «Юрайт» <a href="https://urait.ru/">https://urait.ru/</a>

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

РПД пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2022/2023 учебном году на заседании кафедры химии (протокол № 8 от 26 мая 2022 г.).

В рабочую программу внесены следующие изменения и дополнения:

№ изменения: 3	
№ страницы с изменением: 35	
Из пункта 9.3 исключить:	В пункт 9.3 включить:
1. Polpred.com Обзор СМИ/Справочник ( <a href="http://polpred.com/news">http://polpred.com/news</a> ) 2. ЭБС «Лань» ( <a href="http://e.lanbook.com">http://e.lanbook.com</a> )	1. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU ( <a href="https://elibrary.ru/defaultx.asp?">https://elibrary.ru/defaultx.asp?</a> )

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

РПД пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2022/2023 учебном году на заседании кафедры химии (протокол № 1 от 14 сентября 2022 г.).

В рабочую программу внесены следующие изменения и дополнения:

№ изменения: 4	
№ страницы с изменением: 35	
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».	

**Утверждение изменений и дополнений в РПД для реализации в 2023/2024 уч.г.**

РПД пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2023/2024 учебном году на заседании кафедры химии (протокол № 9 от 28 июня 2023 г.).