

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
Химический факультет

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

### **КВАНТОВАЯ ХИМИЯ**

Кафедра физической и органической химии химического факультета

Образовательная программа

04.05.01 ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ

Профиль подготовки

Неорганическая химия, аналитическая химия, органическая химия

Уровень высшего образования  
Специалитет

Форма обучения  
Очная

Статус дисциплины: базовая

Махачкала, 2020

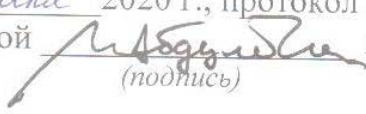
Рабочая программа дисциплины «Квантовая химия» составлена в 2020 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (уровень специалитета) от «12» сентября 2016 г. № 1174.

Разработчик(и): кафедра физической и органической химии, Шабанов О.М., д.х.н.

Рабочая программа дисциплины одобрена:

на заседании кафедры физической и органической химии

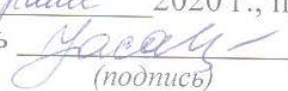
от «4» февраля 2020 г., протокол № 6

Зав. кафедрой  проф. Абдулагатов И.М.

(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета

от «21» февраля 2020 г., протокол № 6.

Председатель  Гасангаджиева У.Г.

(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим управлением «26» 03 2020 г. 

(подпись)

## Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “Квантовая химия” входит в базовую часть образовательной программы Б1.Б.11 специалитета по специальности 04.05.01 - “Фундаментальная и прикладная химия” и является обязательным для изучения.

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической химии.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов: математический аппарат квантовой механики и его применение для определения строения атомов, молекул, построения молекулярных орбиталей и анализа механизмов химических реакций

Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций выпускника: профессиональных ОК-7, ОПК-1,2,3,5,6.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: лекции, практические занятия, самостоятельная работа.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме коллоквиумов, контрольных работ и промежуточный контроль в форме зачета.

Объем дисциплины 5 зачетные единицы, в том числе в академических часах по видам учебных занятий

| Семес<br>тр | Учебные занятия                                |                             |                             |     |                  |                                       | Форма<br>промежуточной<br>аттестации<br>(зачет,<br>дифференциро<br>ванный зачет,<br>экзамен |         |
|-------------|------------------------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----|------------------|---------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------|---------|
|             | в том числе                                    |                             |                             |     |                  |                                       |                                                                                             |         |
|             | Контактная работа обучающихся с преподавателем |                             |                             |     |                  | СРС, в<br>том<br>числе<br>экза<br>мен |                                                                                             |         |
|             | Все<br>го                                      | из них                      |                             |     |                  |                                       |                                                                                             |         |
| Лекц<br>ии  |                                                | Лаборатор<br>ные<br>занятия | Практич<br>еские<br>занятия | КСР | консул<br>ьтации |                                       |                                                                                             |         |
| 7 сем.      | 180                                            | 36                          | -                           | 36  | -                | -                                     | 72+36                                                                                       | экзамен |

### 3. Цели освоения дисциплины

Курс квантовой химии представляет собой начальное введение в фундамент современной теоретической химии. Квантовая теория позволяет предсказать в деталях строение и физико-химические свойства химических соединений.

Квантовая химия использует математический аппарат и методы квантовой механики для описания электронного строения и расчета химических свойств соединений, начиная с атомов и простейших молекул и кончая высокомолекулярными соединениями и конденсированными фазами.

Квантовая химия изучает электронное распределение в стационарных состояниях, взаимное расположение энергетических уровней, является теоретической основой рассмотрения природы химической связи, соответствия между свойствами и строением соединений, количественного описания реакционной способности молекул, правил отбора квантовых переходов и химических реакций.

## 2. Место дисциплины в структуре ОПОП специалиста

Дисциплина «Квантовая химия» входит в базовую часть образовательной программы Б1.Б.11 специалиста по специальности 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия.

В информационном и логическом планах дисциплина «Квантовая химия» последовательно развивает вводный курс «Общая химия», «Неорганическая химия», и, в свою очередь, служит методологической основой при изучении следующих дисциплин: «Органическая химия», «Физическая химия», «Физические методы исследования». Дисциплина «Квантовая химия» информационно и логически связана с общими курсами «Высшая математика», «Физика», «Строение вещества».

## 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения)

| Код компетенции из ФГОС ВО | Формулировка компетенции из ФГОС ВО                                                                                                            | Планируемые результаты обучения                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|----------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ОК-7                       | Готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала                                                               | <b>Знает:</b> требования к высоко квалифицированному специалисту, способному к само развитию и обладающему творческим научным потенциалом самореализации.<br><b>Умеет:</b> развивать свой уровень развития и самореализации на основе повышения своего научного творческого потенциала.<br><b>Владеет:</b> навыками саморазвития на основе регулярного повышения своего творческого потенциала путем изучения новых достижений в отечественной и зарубежной научной литературе, развития своих экспериментальных навыков и использованием современных методов и приборов. |
| ОПК-1                      | Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач | <b>Знает:</b> экспериментальные основы возникновения и этапы развития квантовых представлений о строении и свойствах атомов, молекул неорганических, органических и координационных соединений<br><b>Умеет:</b> применять методы квантовой механики для решения химических задач строения и свойств атомов и молекул,                                                                                                                                                                                                                                                     |

|       |                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|       |                                                                                                                                                  | <p>реакционных способностей молекул и механизмов реакций.</p> <p><b>Владеет</b> современными методами квантовой механики и квантовой химии, навыками применения англоязычных слов и конструкций при поиске информации, создании и работе с программами квантово-химических расчетов.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| ОПК-2 | <p>Владеть навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций</p> | <p><b>Знает:</b> экспериментальные основы возникновения и этапы развития квантовых представлений о строении и свойствах атомов, молекул неорганических, органических и координационных соединений</p> <p><b>Умеет:</b> применять методы квантовой химии для решения химических задач строения и свойств атомов и молекул, реакционных способностей молекул и механизмов реакций.</p> <p><b>Владеет:</b> современными методами квантовой химии, навыками применения англоязычных слов и конструкций при поиске информации, необходимой для объяснения закономерностей в свойствах атомов и молекул и в механизмах химических реакций</p> |
| ОПК-3 | <p>Обладание способностью использовать теоретические основы фундаментальных разделов математики и физики в профессиональной деятельности</p>     | <p><b>Знает:</b> основы математики и физики, математический аппарат квантовой химии, методы установления электронного строения атомов и молекул и индексов реакционной способности молекул.</p> <p><b>Умеет:</b> применять основные законы математики, физики и методы квантовой химии для определения электронного строения атомов и молекул и предсказания направлений химических реакций</p> <p><b>Владеет:</b> теоретическими основами фундаментальных разделов математики, физики и квантово-химическими методами определения строения и свойств атомов и молекул</p>                                                              |
| ОПК-5 | <p>Способность к поиску, обработке, анализу научной информации и формулировке на их основе выводов и</p>                                         | <p><b>Знает:</b> методы поиска и обработки научной информации</p> <p><b>Умеет:</b> применять полученную научную информацию для решения конкретных задач в квантовой механике и квантовой</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |

|       |                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|       | предложений                                                                                           | химии<br><b>Владеет:</b> навыками анализа научной информации и на их основе формулировать выводы и предложения для решения задач определения строения атомов и молекул и их реакционной способности в химии                                                                                                                                                                                                                                                   |
| ОПК-6 | Владеть нормами техники безопасности и уметь реализовать их в лабораторных и технологических условиях | <b>Знает:</b> современные экспериментальные методы исследования электронного строения атомов и молекул и механизмов химических реакций, безопасной техники их реализации в лабораторных и технологических условиях<br><b>Умеет:</b> применять методы техники безопасности при структурных и химических исследованиях в лабораторных и технологических условиях<br><b>Владеет:</b> требованиями техники безопасности в химических лабораториях и производствах |

#### 4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 5 зачетные единицы, 180 академических часов.

4.2. Структура дисциплины.

| №<br>п/п | Разделы и темы<br>дисциплины                                   | Семе<br>стр | Нед<br>еля<br>сем<br>ест<br>ра | Виды учебной работы,<br>включая самостоятельную<br>работу студентов и<br>трудоемкость (в часах) |                                     |                                         |                                  | Самост<br>оательн<br>ая<br>работа | Формы текущего<br>контроля<br>успеваемости (по<br>неделям семест ра)<br>Форма<br>промежуточной<br>аттестации (по<br>семест рам) |
|----------|----------------------------------------------------------------|-------------|--------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|-----------------------------------------|----------------------------------|-----------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|          |                                                                |             |                                | Ле<br>кц<br>ии                                                                                  | Прак<br>тиче<br>ские<br>заня<br>тия | Лаб<br>орат<br>орн<br>ые<br>заня<br>тия | Контр<br>оль<br>самос<br>т. раб. |                                   |                                                                                                                                 |
|          | Модуль 1. Математический аппарат квантовой механики            |             |                                |                                                                                                 |                                     |                                         |                                  |                                   |                                                                                                                                 |
| 1        | Операторы, их<br>свойства. Свойства<br>эрмитовых<br>операторов | 6           |                                | 2                                                                                               | 4                                   |                                         |                                  | 6                                 | устный опрос,<br>тестирование                                                                                                   |
| 2        | Постулаты квантовой<br>механики                                | 6           |                                | 2                                                                                               | 2                                   |                                         |                                  | 4                                 | устный опрос,<br>тестирование                                                                                                   |
| 3        | Полное и стационарное<br>уравнения Шредингера                  | 6           |                                | 2                                                                                               | 2                                   |                                         |                                  | 6                                 | устный опрос,<br>тестирование                                                                                                   |
| 4        | Одномерные задачи<br>квантовой химии                           |             |                                | 2                                                                                               | 2                                   |                                         |                                  | 4                                 | устный опрос,<br>тестирование                                                                                                   |
|          | Ит ого по модулю 1:                                            |             | 36                             | 8                                                                                               | 10                                  |                                         |                                  | 20                                | коллоквиум                                                                                                                      |

| Модуль 2. Решение уравнение Шредингера для водородоподобного атома.<br>Многоэлектронные атомы                                           |                                                                             |   |     |    |    |  |  |       |                            |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|---|-----|----|----|--|--|-------|----------------------------|
| 1                                                                                                                                       | Разделение переменных и решение ур. Шредингера.                             | 6 |     | 2  | 2  |  |  | 6     | устный опрос, тестирование |
| 2                                                                                                                                       | Атомные орбитали. Графическое представление $R(r)$ и $Y(Q, \varphi)$        | 6 |     | 2  | 2  |  |  | 4     | устный опрос, тестирование |
| 3                                                                                                                                       | Энергии, средние и наиболее вероятные радиусы АО                            | 6 |     | 2  | 2  |  |  | 2     | устный опрос, тестирование |
| 4                                                                                                                                       | Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока. Термы атомов                     |   |     | 2  | 2  |  |  | 4     | устный опрос, тестирование |
| <i>Итого по модулю 2:</i>                                                                                                               |                                                                             |   | 36  | 8  | 8  |  |  | 20    | коллоквиум                 |
| Модуль 3. Приближенные методы решения квантово-механических задач для молекул                                                           |                                                                             |   |     |    |    |  |  |       |                            |
| 1                                                                                                                                       | Теория возмущений при отсутствии и наличии вырождения.                      | 6 |     | 4  | 2  |  |  | 4     | устный опрос, тестирование |
| 2                                                                                                                                       | Вариацион. метод. Метод МО ЛКАО                                             | 6 |     | 2  | 2  |  |  | 4     | устный опрос, тестирование |
| 3                                                                                                                                       | $\pi$ -сопряженные системы молекул                                          | 6 |     | 2  | 4  |  |  | 4     | устный опрос, тестирование |
| 4                                                                                                                                       | Электронные параметры атомов и связей                                       |   |     | 2  | 2  |  |  | 4     | устный опрос, тестирование |
| <i>Итого по модулю 3:</i>                                                                                                               |                                                                             |   | 36  | 10 | 10 |  |  | 20    | коллоквиум                 |
| Модуль 4. Индексы реакционной способности молекул Сохранение орбитальной симметрии. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов |                                                                             |   |     |    |    |  |  |       |                            |
| 1                                                                                                                                       | Индексы реакционной способности молекул и направление реакций.              | 6 |     | 2  | 2  |  |  | 4     | устный опрос, тестирование |
| 2                                                                                                                                       | Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях                      | 6 |     | 2  | 2  |  |  | 4     | устный опрос, тестирование |
| 3                                                                                                                                       | Расщепление d-уровня в комплексах. Строение координационных соединений. ТКП | 6 |     | 4  | 2  |  |  | 4     | устный опрос, тестирование |
| 4                                                                                                                                       | Теория поля лигандов. Правило 18 электронов                                 |   |     | 2  | 4  |  |  | 4     | устный опрос, тестирование |
| <i>Итого по модулю 4:</i>                                                                                                               |                                                                             |   | 36  | 10 | 10 |  |  | 16    | коллоквиум                 |
| <i>Модуль 5. Подготовка к экзамену</i>                                                                                                  |                                                                             |   | 36  |    |    |  |  | 36    | экзамен                    |
| <b>ВСЕГО:</b>                                                                                                                           |                                                                             |   | 180 | 36 | 36 |  |  | 72+36 | экзамен                    |

#### **4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).**

##### **4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине**

##### **Модуль 1. Математический аппарат квантовой механики**

**Тема 1.** Операторы квантовой механики. Возникновение квантовой механики. Постулаты Бора. Операторы. Эрмитовы операторы

**Тема 2.** Постулаты квантовой механики. Постулаты квантовой механики. Операторы физических величин

**Тема 3.** Полное уравнение Шредингера. Уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера. Временное уравнение Шредингера

**Тема 4.** Одномерные задачи квантовой механики. Свободная частица. Частица в одномерной потенциальной яме. Движение частицы через потенциальный барьер

##### **Модуль 2. Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Многоэлектронные атомы**

**Тема 1.** Разделение переменных и решение уравнения Шредингера. Решение уравнения Шредингера разделением сферических

**Тема 2.** Атомные орбитали. Графическое представление  $R(r)$  и  $Y(Q, \varphi)$ . Построение функций  $\Phi_m(\varphi)$ ,  $Q_{l,m}(\vartheta)$ ,  $R_{n,l}(r)$  и сферических гармоник. Построение АО  $\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)$ .

**Тема 3.** Энергии, средние и наиболее вероятные радиусы АО. Вычисление средних энергий и радиусов наиболее вероятных радиусы АО

**Тема 4.** Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока. Термы атомов Гамильтониан многоэлектронных атомов. Усреднение отталкивания и самосогласование Хартри. Метод Хартри-Фока.

##### **Модуль 3. Приближенные методы решения квантово-механических задач для молекул**

**Тема 1.** Теория возмущений при отсутствии и наличии вырождения. Теория возмущений при отсутствии вырождения. Теория возмущений при наличии вырождения

**Тема 2.** Вариационный метод. Метод МО ЛКАО. Вариационная теорема. Вариацион. метод. Метод МО ЛКАО.

**Тема 3.**  $\pi$ -сопряженные системы молекул.  $\pi$ -сопряженные системы молекул. Линейные полиены. Циклические полиены.

**Тема 4.** Электронные параметры атомов и связей. Электронные плотности атомов, порядки связей и индексы свободой валентности как индексы реакционной способности молекул.

##### **Модуль 4. Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях**

**Тема 1.** Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях Термическое и фотохимическое инициирование электроциклических реакций внутримолекулярной циклизации.

**Тема 2.** Сохранение орбитальной симметрии в перициклических реакциях  
Термическое и фотохимическое инициирование перециклических реакций  
циклоприсоединения.

**Тема 3.** Теория кристаллического поля. Теория поля лигандов  
Расщепление d-уровней переходных металлов в поле лигандов различной  
симметрии. Молекулярные орбитали комплексных соединений, правило 18  
связывающих электронов.

#### **4.3.2. Содержание лабораторно-практических занятий по дисциплине**

##### **Модуль 1. Математический аппарат квантовой механики**

**Тема 1. Операторы их свойства. Свойства эрмитовых операторов**

**Практ. занятие 1.** Теория Бора. Операторы. Определения.

**Вопросы к теме:**

1. В каких экспериментальных результатах выразился кризис классической физики?
2. Какие операторы называются самосопряженными?
5. Является ли самосопряженным оператор Лапласа?

**Практическое занятие 2.** Операторы квантовой механики. Коммутационные соотношения. Матричное представление операторов. Основные постулаты и физические основы квантовой механики. Полное уравнение Шредингера. Уравнение для стационарных и изменяющихся во времени состояний.  
**Практ.занятие 1.** Основные операторы квантовой механики. Оператор Гамильтониана. Коммутационные соотношения Собственные функции и собственные значения квантово-механических операторов физических величин.

**Вопросы к теме:**

1. Как выражаются соотношения между квантово-механическими операторами физических величин?
2. Какое условие должно выполняться, чтобы две физические величины имели одновременно определенные значения?
3. Какой оператор сопоставляется с проекцией момента импульса  $M_z$  ?

**Тема 2. Одномерные задачи квантовой механики**

**Практическое занятие 1.** Свободная частица. Частица в одномерной потенциальной яме. Движение частицы вдоль одномерного потенциального барьера. Жесткий ротатор. Сферические гармоники. Гармонический осциллятор. Функции Эрмита. Распределение вероятности межъядерных расстояний.

**Вопросы к теме:**

1. От каких координат зависит волновая функция в полном уравнении Шредингера?
2. Зависимость  $\psi(x)$  и  $\psi^2(x)$  от  $x$  для различных  $n$  для частицы в потенциальной яме?
3. Зависимость  $\psi(r)$  и  $\psi^2(r)$  для ГО при различных значениях колебательного квантового числа.

4. симметричные и сферические волчки. Сферические гармоники

**Вопросы к теме:**

1. В каких условиях неизбежно возникает дискретный характер изменения энергии?
2. Как определяется полная энергия частицы в классической и квантовой механике?
3. В чем разница преодоления барьера в классической и квантовой механике?

**Тема 3. Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Многоэлектронные атомы. Периодическая система элементов.**

**Практическое занятие 1.** Решение уравнения Шредингера в сферических координатах. Разделение переменных. Получение R-, Q- и  $\Phi$ -уравнений. Построение полных  $\psi(r, \theta, \phi)$  АО.

Метод ССП Хартри. Уравнения Хартри. Метод Хартри-Фока. Принцип Паули. Определители Слэтера для атомов водорода и лития. Электронные конфигурации атомов. Принципы построения периодической системы элементов.

**Вопросы к теме:**

1. Какие функции являются решениями R-уравнения?
2. Какие функции являются решениями Q-уравнения?
3. Какие функции являются решениями  $\Phi$ -уравнения?
4. . Вычисление средних энергий и радиусов 1s – и 2s- АО.
5. Графическое представление  $R(r)$ ,  $R^2(r)$  и  $Y(Q, \phi)$ . Принципы построения периодической системы элементов.
6. Что такое узловые точки (узловые плоскости), при каких квантовых числах они появляются и чему равно их число?
7. В чем смысл и необходимость процедуры самосогласования?
8. Как выражается принцип Паули в квантовой механике?
9. В каких условиях проявляется мультиплетность термов?
1. В чем смысл и необходимость процедуры самосогласования?
2. Как выражается принцип Паули в квантовой механике?
3. В каких условиях проявляется мультиплетность термов?

**Модуль 2. Приближенные методы решения квантово-механических задач для молекул**

**Тема 1. Метод теории возмущений.**

**Практическое занятие 1.** Теория возмущений при отсутствии и наличии вырождения. Водородоподобный атом и гармонический осциллятор в теории возмущений.

**Вопросы к теме:**

1. В чем разница теории возмущений при отсутствии и наличии вырождения?
2. Какие виды выражения оператора потенциальной энергии для решения уравнения Шредингера в методе возмущений вам известны?

3. В чем основное различие в методах возмущений и вариационного принципа?

## **Тема 2. Вариационный метод. Метод МО ЛКАО. Простой и расширенный методы Хюккеля.**

Практ. занятие 1. Вариационная теорема. Вариационный принцип. Атом водородоподобный атом и гармонический осциллятор в вариационном методе. Метод МО ЛКАО. Уравнения Рутаана.

### **Вопросы к теме:**

1. В вариационном методе ограничена ли приближенная энергия снизу или сверху?
2. Что варьируется в вариационном методе: пробные функции или коэффициенты при них?
3. В каком условии система однородных уравнений имеет нетривиальное решение?

Практическое занятие 2. Метод МО ЛКАО. Уравнения Рутаана. Вычисление энергий и волновых функций МО. Простой метод. Расширенный метод Хюккеля. Нахождение энергий, волновых функций, вычисление интегралов перекрывания и матричных элементов.

### **Вопросы к теме:**

1. Базисные функции для построения МО.
1. Энергии волновые функции молекулы водорода.
2. Кулоновский, обменный и перекрывания интегралы.
3. Вычисление интегралов  $H_{\alpha\alpha}$ ,  $H_{\alpha\beta}$ ,  $S_{\alpha\beta}$  для молекулярного иона водорода.

## **Тема 3. Линейные полиены и аннулены в методе МОХ. ИРС.**

Практическое занятие 1. Построение МО, вычисление орбитальных энергий и распределение электронов.

### **Вопросы к теме:**

1. Линейные полиены и аннулены?
2. Решение систем секулярных уравнений для линейных и циклических полиенов.
3. Расчет электронных плотностей на атомах, порядков связей, индексов свободной валентности.

## **Модуль 3. Приближенные методы решения квантово-механических задач для молекул**

**Тема 1.** Теория возмущений при отсутствии и наличии вырождения.

**Практ. занятие 1.** Теория возмущения стационарных состояний при отсутствии и наличии вырождения.

### **Вопросы к теме**

1. Какие операторы и какие базисные функции применяются в методе возмущений?
2. В чем разница теории возмущений при отсутствии и наличии вырождения?

3. Какие виды выражения оператора потенциальной энергии для решения уравнения Шредингера в методе возмущений вам известны?

**Практ. занятие 2.** Теория возмущения стационарных состояний при наличии вырождения. Атом водорода и гармонический осциллятор в теории возмущений.

**Вопросы к теме**

1. В чем основное различие в методах возмущений и вариационного принципа?
2. Атом гелия в методе возмущений
3. Анггармонический осциллятор в методе возмущений

**Тема 2. Вариационный метод. Метод МО ЛКАО**

**Практ. занятие 1.** Вариационный метод. Вариационная теорема. Атом водорода и гармонический осциллятор в вариационном методе. Уравнения Рутаана. Молекулярный ион водорода.

**Вопросы к теме:**

1. В вариационном методе ограничена ли приближенная энергия снизу или сверху?
2. Что варьируется в вариационном методе: пробные функции или коэффициенты при них?
3. В каком условии система однородных уравнений имеет нетривиальное решение?

Практическое занятие 2. Метод МО ЛКАО. Уравнения Рутаана. Вычисление энергий и волновых функций МО. Простой метод. Расширенный метод Хюккеля. Нахождение энергий, волновых функций, вычисление интегралов перекрывания и матричных элементов.

**Тема 3  $\pi$ -сопряженные системы молекул**

**Практ. занятие 1.** Метод МОХ. Линейные полиены. Аннулены. Закономерности в МО и их энергиях. Ароматичность аннуленов.

**Вопросы к теме:**

1. Закономерности в МО линейных и моноциклических полиенов.
2. Закономерности в энергиях МО линейных и моноциклических полиенов
3. В чем смысл правила ароматичности Хюккеля?

**Тема 4. Электронные параметры атомов и связей**

**Практ. занятие 1.** Электронные параметры атомов и связей. Альтернантные и неальтернантные углеводороды.

**Вопросы к теме:**

1. Приведите электронные плотности на атомах молекул бутадиена и циклопропена. В чем качественная разница?
2. Укажите ароматичность в нейтральных и заряженных аннуленов.
3. Как определяется индекс свободной валентности молекул?

## **Модуль 4. Индексы реакционной способности молекул. Сохранение орбитальной симметрии. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов**

**Тема 1.** Индексы реакционной способности молекул и направление реакций

**Практ. занятие 1.** Индексы реакционной способности. Электронные заряды, индексы свободной валентности, граничные орбитали. Приближения изолирующей и реагирующей молекул.

**Вопросы к теме:**

1. Что включается в индексы реакционной способности молекул?
2. Как распределены электронные плотности на атомах линейных полиенов и аннуленов?
3. Каковы индексы свободной валентности атомов углерода в молекуле нафталина?

**Тема 2. Сохранение орбитальной симметрии**

**Практ. занятие 1.** Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения, циклообразования и циклотропных реакциях.

**Вопросы к теме:**

1. Приведите примеры реакций циклоприсоединения, циклообразования и циклотропных реакциях.
2. Какие реакции циклоприсоединения разрешены термически при числе электронов  $4q$ ?
3. Какие реакции циклообразования разрешены термически при числе электронов  $4q$ ?

**Тема 3.** Расщепление d-уровня в комплексах. Строение координационных соединений. ТКП.

**Практ. занятие 1.** Теория кристаллического поля. Расщепление d-уровня в октаэдрическом и тетраэдрическом полях лигандов.

**Вопросы к теме:**

1. Чему равна энергия стабилизации кристаллическим полем в случае гексацианидного комплекса  $Ni^{2+}$ ?
2. Чему равна энергия стабилизации кристаллическим полем в случае тетрахлоридного комплекса  $Ti^{3+}$ ?
3. При каком числе d-электронов парамагнитны тетраэдрические хлоридные комплексы d-металлов?

**Практ. занятие 2.** Энергии стабилизации кристаллическим полем. Эффект Яна-Теллера.

**Вопросы к теме:**

- Чему равна энергия стабилизации кристаллическим полем в случае гексацианидного комплекса  $Fe^{2+}$ ?
2. Чему равна энергия стабилизации кристаллическим полем в случае тетрахлоридного комплекса  $Fe^{3+}$ ?
  3. При каком числе d-электронов парамагнитны октаэдрические цианистые комплексы d-металлов?

#### **Тема 4. Теория поля лигандов. Правило 18 электронов. Дативно-ковалентная связь**

**Практ. занятие 1.** Теория поля лигандов. МО комплексов. Правило 18 электронов октаэдрических комплексов.

##### **Вопросы к теме**

1. Чему равна энергия стабилизации кристаллическим полем в случае гексацианидного комплекса  $\text{Fe}^{2+}$ ?
2. Чему равна энергия стабилизации кристаллическим полем в случае тетрахлоридного комплекса  $\text{Fe}^{3+}$ ?
3. В чем содержание правила 18 электронов в октаэдрических комплексах?

#### **5. Образовательные технологии**

В ходе освоения дисциплины предусматривается применение следующих активных методов обучения:

- классические лекции с программируемым опросом, с использованием интерактивных средств - не менее 25%;
- обеспечение студентов конспектами лекций;
- семинарские занятия с анализом узловых теоретических положений, выделенных в лекциях;
- контрольные работы по каждому разделу темы курса;
- решение задач с использованием интерактивных и вычислительных средств, в том числе компьютерного моделирования структур сложных молекул приближенными методами квантовой химии и структуры жидкостей методом молекулярной динамики – не менее 10%;
- выполнение студентами индивидуальных многоэтапных и многовариантных задач, организация самостоятельного обучения;
- выполнение рефератов и докладов с их защитой;
- выполнение моделей молекул по методу стержень-шарик.
- итоговой контроль осуществляется посредством рейтинговой оценки

#### **6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов.**

*Виды и порядок выполнения самостоятельной работы*

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Подготовка реферата, презентации и доклада.
3. Решение задач.
4. Подготовка к коллоквиуму.
5. Подготовка к зачету.

| №  | Вид самостоятельной работы                                                  | Вид контроля                                                                              | Учебно-методич. обеспечение              |
|----|-----------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------|
| 1. | Изучение рекомендованной литературы.                                        | Устный опрос по разделам дисциплины.                                                      | См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа. |
| 2. | Подготовка реферата (до 10-15 страниц), презентации и доклада (25-30 минут) | Прием реферата, презентации, доклада и оценка качества их исполнения на мини конференции. | См. разделы 7.2, 8, 9 данного документа. |

|    |                          |                                                      |                                               |
|----|--------------------------|------------------------------------------------------|-----------------------------------------------|
| 3. | Решение задач            | Проверка домашних задач.                             | См. разделы 7.2, 8, 9 данного документа.      |
| 4. | Подготовка к коллоквиуму | Промежуточная аттестация в форме контрольной работы. | См. разделы 7.2, 7.3, 8, 9 данного документа. |
| 5. | Подготовка к зачету.     | Устный опрос, либо компьютерное тестирование.        | См. разделы 7.2, 7.3, 8, 9 данного документа. |

1. Текущий контроль: подготовка реферата, презентации и доклада.

2. Текущий контроль: решение задач.

3. Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.

*Текущий контроль* успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу практических занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Для текущего контроля используется и такой вид самостоятельной работы как подготовка рефератов, содержание которых будет представлено публично на практическом занятии и сопровождается презентацией. Выбор темы реферата согласуется с лектором.

*Промежуточный контроль* проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

*Итоговый контроль* проводится либо в виде устного экзамена, либо в форме тестирования.

Оценка “отлично” ставится за уверенное владение материалом курса.

Оценка “хорошо” ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале.

Оценка “удовлетворительно” ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса.

Оценка “неудовлетворительно” ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

## **7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

7.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.

Перечень компетенций с указанием этапов их формирования приведен в описании образовательной программы.

| Код компетенции из ФГОС ВО | Наименование компетенции из ФГОС ВО                                   | Знания, умения, навыки                                                                                                                                    | Процедура освоения                           |
|----------------------------|-----------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------|
| ОК-7                       | Готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого | <b>Знает:</b> требования к высоко квалифицированному специалисту, способному к само развитию и обладающему творческим научным потенциалом самореализации. | Устный опрос, письменный опрос, тестирование |

|       |                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                                         |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ОПК-1 | потенциала                                                                                                                                     | <p><b>Умеет:</b> развивать свой уровень развития и самореализации на основе повышения своего научного творческого потенциала.</p> <p><b>Владеет:</b> навыками саморазвития на основе регулярного повышения своего творческого потенциала путем изучения новых достижений в отечественной и зарубежной научной литературе, развития своих экспериментальных навыков и использованием современных методов и приборов.</p> <p><b>Знает:</b> экспериментальные основы возникновения и этапы развития квантовых представлений о строении и свойствах атомов, молекул неорганических, органических и координационных соединений</p> <p><b>Умеет:</b> применять методы квантовой механики для решения химических задач строения и свойств атомов и молекул, реакционных способностей молекул и механизмов реакций.</p> <p><b>Владеет:</b> современными методами квантовой механики и квантовой химии, навыками применения англоязычных слов и конструкций при поиске информации, создании и работе с программами квантово-химических расчетов.</p> | <p>Устный опрос, письменный опрос, тестирование</p> <p>Устный опрос, письменный опрос, тестирование</p> |
|       | Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                                         |
| ОПК-2 | Владеть навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций      | <p><b>Знает:</b> экспериментальные основы возникновения и этапы развития квантовых представлений о строении и свойствах атомов, молекул неорганических, органических и координационных соединений</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | Устный опрос, письменный опрос, тестирование                                                            |
|       |                                                                                                                                                | <p><b>Умеет:</b> применять методы квантовой химии для решения химических задач строения и свойств атомов и молекул, реакционных способностей молекул и механизмов реакций.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | Письменный опрос, коллоквиум                                                                            |
|       |                                                                                                                                                | <p><b>Владеет:</b> современными методами квантовой химии, навыками применения англоязычных слов и конструкций при поиске информации, необходимой для объяснения закономерностей в свойствах атомов и молекул и в механизмах химических реакций</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | письменный опрос, тестирование                                                                          |
| ОПК-3 | Обладание способностью                                                                                                                         | <p><b>Знает:</b> основы математики и физики, математический аппарат квантовой</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Устный опрос, письменный                                                                                |

|       |                                                                                                                |                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                              |
|-------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|
| ОПК-5 | использовать теоретические основы фундаментальных разделов математики и физики в профессиональной деятельности | химии, методы установления электронного строения атомов и молекул и индексов реакционной способности молекул                                                                                                       | опрос, тестирование                                                                          |
|       |                                                                                                                | <b>Умеет:</b> применять основные законы математики, физики и методы квантовой химии для определения электронного строения атомов и молекул и предсказания направлений химических реакций                           | Письменный опрос, коллоквиум                                                                 |
|       |                                                                                                                | <b>Владеет:</b> теоретическими основами фундаментальных разделов математики, физики и квантово-химическими методами определения строения и свойств атомов и молекул                                                | Круглый стол, деловая игра, мини-конференция<br>Устный опрос, письменный опрос, тестирование |
| ОПК-6 | Способность к поиску, обработке, анализу научной информации и формулировке на их основе выводов и предложений  | <b>Знает:</b> методы поиска и обработки научной информации                                                                                                                                                         | Круглый стол, деловая игра, мини-конференция                                                 |
|       |                                                                                                                | <b>Умеет:</b> применять полученную научную информацию для решения конкретных задач в квантовой механике и квантовой химии                                                                                          | Круглый стол, деловая игра, мини-конференция                                                 |
|       |                                                                                                                | <b>Владеет:</b> навыками анализа научной информации и на их основе формулировать выводы и предложения для решения задач определения строения атомов и молекул и их реакционной способности в химии                 | Круглый стол, деловая игра                                                                   |
|       |                                                                                                                | <b>Знает:</b> современные экспериментальные методы исследования электронного строения атомов и молекул и механизмов химических реакций, безопасной техники их реализации в лабораторных и технологических условиях | Устный опрос, письменный опрос, тестирование                                                 |
| ОПК-6 | Владеть нормами техники безопасности и уметь реализовать их в лабораторных и лабораторных условиях             | <b>Умеет:</b> применять методы техники безопасности при структурных и химических исследованиях в лабораторных и технологических условиях                                                                           | Устный опрос, коллоквиум                                                                     |
|       |                                                                                                                | <b>Владеет:</b> требованиями техники безопасности в химических лабораториях и производствах                                                                                                                        | Круглый стол, деловая игра, мини-                                                            |

## 7.2. Типовые контрольные задания

### Контрольные вопросы к зачету

1. Возникновение квантовой механики, основные этапы развития. Главные тенденции в ее развитии.
2. Теория Бора. Спектр атома водорода. Получить постоянную Ридберга.
3. Операторы. Операторное уравнение. Собственные функции и собственные значения. Вырождение.
4. Свойства эрмитовых операторов, их собственных функций и собственных значений.
5. Представление операторов в матричной форме. Коммутационные соотношения.
6. Принцип соответствия и основные операторы квантовой механики – операторы координат, импульсов, момента импульса, его квадрата и проекций, кинетической энергии и полной энергии.
7. Собственные функции и собственные значения операторов  $\hat{P}_x, \hat{P}, \hat{T}$ .
8. Решение уравнения Шредингера для частицы в одномерной потенциальной яме.
9. Момент импульса и его проекция.
10. Операторы спина. Коммутационные соотношения между операторами квантовой механики.
11. Сферические координаты. Операторы квантовой механики в сферических координатах.
12. Основные постулаты квантовой механики. Волновая функция. Средние значения наблюдаемых физических величин.
13. Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера. Оператор полной энергии (гамильтониан).
14. Спин. Оператор спина. Правила коммутации операторов проекций спина.
15. Решение уравнения Шредингера для свободной частицы.
16. Вектор плотности тока вероятности. Законы сохранения в квантовой механике.
17. Решение уравнения Шредингера для частицы в прямоугольной потенциальной яме. Анализ решений
18. Одномерный потенциальный барьер. Вектор плотности тока вероятности. Коэффициенты отражения и прохождения.
19. Анализ решения уравнения Шредингера для одномерной потенциальной ямы и одномерного потенциального барьера. Основные выводы.
20. Решение уравнения Шредингера для атома водорода (сферические координаты, разделение переменных)
21. Решения R-,  $\theta$  – и  $\Phi$ - уравнений для атома водорода. Квантовые числа.
22. Сферические гармоники, их нормирование.
23. Квантовые числа. Атомные орбитали. Графики зависимости R,  $R^2$  и  $4\pi r^2 R^2$  -г n=1,2.

24. Решение уравнения Шредингера для гармонического осциллятора. Построить  $\psi_0$ ,  $\psi_1$  и  $\psi_2$  для ГО. График зависимости  $U_0$  от смещения.
25. Атом водорода в вариационном методе.
26. Орбитальный момент и возможные значения его проекции  $L_z$ .
27. Разделение электронного и ядерного движения для молекулярного уравнения Шредингера.
28. Теория возмущений при отсутствии и наличии вырождения.
29. Многоэлектронные атомы. Метод ССП Хартри. Усреднение отталкивания электронов, процедура самосогласования.
30. Антисимметризованные спин-орбитали. Определитель Слэтера. Принцип Паули.
31. Метод Хартри – Фока.
32. Обменное взаимодействие, обменный интеграл в методах ВС и МО.
33. Символы термов Рассела-Саундерса. Термы атомов и их ионов.
34. Вариационная теорема и вариационный принцип.
35. Метод МО ЛКАО. Простой и расширенный методы Хюккеля.
36. Молекулярный ион водорода  $H_2^+$ .
37. МО двухатомных гетеронуклеарных молекул. Распределение электронной плотности на МО.
38. Метод МО. Энергии связывающей и разрыхляющей орбиталей – выразить через  $\epsilon_{aa}$ ,  $\epsilon_{ab}$  и  $S_{ab}$
39. Метод МО на примере молекулы С-С-С.
40. Линейные полиены. Закономерности в МО и их энергиях.
41. Аннулены. Закономерности в МО. Правило ароматичности  $4m+2$  Хюккеля.
42. Учет симметрии при решении систем секулярных уравнений на примере молекулы бензола.
43. Метод Хюккеля (МОХ) для молекул с гетероатомом. Сопоставить  $E_j$  для пар этилен- формальдегид, бутadiен- акролеин, метиленициклопропен- циклопропенон.
44. Электронные параметры атомов и связей в методе МОХ.
45. Теоремы об АУ (с иллюстрацией).
46. Проверка результатов расчетов по Хюккелю на примере молекулы метиленициклопропена.
47. Теория возмущений на основе простого метода МОХ.
48. Поляризуемости атомов и связей. Расчет  $\pi_{1,1}$  в молекуле бутadiена.
48. Индексы реакционной способности. Приближение реагирующей молекулы.  $\sigma$  - и  $\pi$  - комплексы.
49. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических химических реакциях. Реакции циклоприсоединения, циклообразования, сигматропные.
50. Обобщенное правило Вудворда-хоффмана. Роль граничных орбиталей.
51. Теория кристаллического поля. Расщепление d-уровней в тетраэдрическом и октаэдрическом комплексах.

52. Теория кристаллического поля. ЭСКП: октаэдрический комплекс слабого поля.
53. Энергия стабилизации кристаллическим полем.
54. Октаэдрический комплекс сильного поля. ЭСКП.
55. Теория кристаллического поля. Тетраэдрический комплекс слабого поля.
56. Эффект Яна-Теллера.
57. Теория поля лигандов. МО октаэдрического комплекса. Правило 18 электронов.
58. Приближенные методы ССП. Методы ППДП и ЧПДП. Параметризация в методах.
59. Введение конфигурационного взаимодействия в рамках методов дифференциального перекрывания. Метод Парра-Попла-Паризера.

### Примерные тестовые задания

1. Чему равна длина волны де Бройля, связанная с электроном, ускоренным под действием разности потенциалов 100 В?
  - 1) 1,22 пм
  - 2) 999 нм
  - 3) 1,22 нм
  - 4) 122 пм
2. Чему равна вероятность нахождения  $1S$ -электрона атома водорода внутри небольшой сферы объемом  $1 \text{ пм}^3$  с центром в ядре?
  - 1)  $2,14 \times 10^{-4}$
  - 2)  $2,14 \times 10^{-6}$
  - 3)  $2,14 \times 10^{-3}$
  - 4)  $2,14 \times 10^{-5}$
3. Волновая функция  $\Psi(\{x\}, t)$  должна быть
  - 1) действительной
  - 2) дифференцируемой
  - 3) антисимметричной
  - 4) положительной
4. Общие требования к волновой функции. Волновая функция  $\Psi(\{x\}, t)$  должна быть
  - 1) определенной во всей области изменения переменных;
  - 2) конечной
  - 3) однозначной
  - 4) неотрицательной
5. В квантовой механике одновременно не могут быть определены с любой точностью
  - 1) импульс и энергия
  - 2) координаты и скорость
  - 3) импульс и координаты
  - 4) энергия и время
6. Собственные значения эрмитова оператора всегда
  - 1) комплексные
  - 2) образуют непрерывный спектр
  - 3) действительны
  - 4) положительные
7. Для линейного оператора  $A$  верно
  - 1)  $Af_1 f_2 = Af_1 + Af_2$
  - 2)  $Aaf = aAf$
  - 3)  $A(f_1 + f_2) = (Af_1)(Af_2)$
  - 4)  $A(a_1 f_1 + a_2 f_2) = a_1 Af_1 + a_2 Af_2$

8. Определите, чему равна сумма  $\sum_n \sum_k c_n^* c_k \int \psi_n^* \psi_k d\tau$ , если функции  $\psi_n(\psi_k)$  ортонормированны.

- 1)  $C_k^2$                       2) 1                      3) 0                      4)  $\sum C_n$

9. В каких из приведенных ниже равенствах содержатся линейные операторы?

- 1)  $Af = \frac{\partial}{\partial x} f$                       2)  $Af = \frac{\partial^2}{\partial x^2} f$                       3)  $Af = -f$                       4)  $Af = f^3$

10. Чему равен результат действия оператора  $\nabla_{Q,\varphi}^2$  на функцию  $\exp(im\varphi)$ ?

- 1)  $-(m^2 / \sin^2 \vartheta) \exp(im\varphi)$                       2)  $m^2 \exp(im\varphi)$                       3)  $\sin^2 \vartheta$                       4)  $m^2 / \sin^2 \vartheta$

11. Радиальная часть волновой функции определяется квантовым числом (квантовыми числами)

- 1) s                      2) l                      3) m                      4) n

12. Чему равна  $M_z$ -компонента углового момента электрона в водородоподобном атоме

- 1)  $m_l \cdot \hbar$                       2)  $m_l$                       3)  $\hbar \sqrt{l(l+1)}$                       4) 0,0

13. Как функция является решением  $\theta$ -уравнения для водородоподобного атома

- 1) Присоединенный полином Лежандра                      2) Полином Шредингера  
3) присоединенный полином Лагерра                      4) Полином Чебышева-Эрмита

14. Какие квантовые числа содержатся в сферических гармониках в качестве параметров

- 1)  $\vartheta$  и  $\varphi$                       2) n и l                      3) l и m                      4) n и S

15. При каких значениях углов  $\vartheta$  и  $\varphi$  волновая функция  $\psi_{n,l,1}$  имеет максимальное значение

- 1)  $\vartheta = 0; \varphi = 0$                       2)  $\vartheta = 90^\circ; \varphi = 0$                       3)  $\vartheta = 90^\circ; \varphi = 90^\circ$                       4)  $\vartheta = 0; \varphi = 90^\circ$

16. Расстояние наиболее вероятного пребывания электрона от ядра в атоме водорода (вычислите) равен

- 1)  $a_0$                       2)  $1,5a_0$                       3)  $2a_0$                       4)  $0,53a_0$

17. Среднее значение радиуса 1S-орбитали в ионе  $\text{He}^+$  равен (вычислите)

- 1)  $0,75a_0$                       2)  $2a_0$                       3)  $a_0$                       4)  $1,5a_0$

18. Чему равна кратность вырождения уровня с данным значением орбитального квантового числа  $l$ ?

- 1)  $l$                       2)  $l+1$                       3)  $l-1$                       4)  $2l+1$

19. Расстояние наиболее вероятного пребывания электрона от ядра в ионе  $He^+$  равен

- 1)  $0,5a_0$                       2)  $1,5a_0$                       3)  $a_0$                       4)  $2a_0$

20. Вектор орбитального момента  $\vec{M}$  может быть расположен (при данном угле  $\vartheta$ )

- 1) вдоль оси Z  
2) в одном направлении, несовпадающим с осью Z  
3) в бесконечном числе направлений относительно оси Z  
4) в  $2l+1$  направлениях относительно оси Z

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

- 1) всегда равен 0                      2) зависит от условий нормировки  
3) всегда равен 1                      4) зависит от значений  $l$

22. Выберите правильные утверждения. Радиальная составляющая волновой функции

- 1) входит в состав волновой функции электрона в атоме  $\psi(r, \vartheta, \varphi)$  как сомножитель  $R_{n,l}$   
2)  $R \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$   
3) волновые функции с одинаковыми  $R_{n,l}(r)$  вырождены по энергии  
4)  $R \rightarrow \infty$  при  $r \rightarrow \infty$

23. Угловая часть волновой функции определяется квантовыми числами

- 1)  $(m, s)$                       2)  $(n, l)$                       3)  $(l, m)$                       4)  $(n, m)$

24. Для атома углерода возможны термы:  $^1S, ^3P, ^1D$ . Укажите последовательность энергий состояний

- 1)  $^1D < ^3P < ^1S$                       2)  $^3P < ^1D < ^1S$                       3)  $^3P < ^1S < ^1D$                       4)  $^1S < ^3P < ^1D$

25. Для конфигурации  $P^3$  найдены термы:  $^5S, ^3S, ^3P, ^1D, ^3D$ . Установите последовательность состояний по устойчивости

- 1)  $^5S < ^3D < ^3P < ^1S < ^1D$                       2)  $^5S < ^3S < ^3P < ^1D < ^3D$                       3)  $^5S, ^3S, ^3P, ^1D, ^3D$   
4)  $^5S, ^3S, ^3P, ^1D, ^2D$

26. Для конфигурации  $P^4$  найдены термы:  $^1S, ^3P, ^1D$ . Установите последовательность состояний по устойчивости

1)  $^3P \prec ^1D \prec ^1S$       2)  $^1S \prec ^3P \prec ^1D$       3)  $^1D \prec ^3P \prec ^1S$       4)  $^1S \prec ^1D \prec ^3P \prec ^1D$

27. У каких пар электронных конфигураций одинаковы термы

1)  $p$  и  $p^5$ ,  $p^2$  и  $p^4$       2)  $p^3$  и  $p^5$ ,  $p^4$  и  $p^6$       3)  $s^1$  и  $p^3$ ,  $p^1$  и  $d^1$       4)  $p^3$  и  $d^2$ ,  $p^1$  и  $d^1$

28. Укажите терм основного состояния для электронной конфигурации  $d^2$

1)  $^3P$       2)  $^4F$       3)  $^3F$       4)  $^2D$

29. Укажите терм основного состояния для электронной конфигурации  $d^8$

1)  $^4F$       2)  $^3F$       3)  $^3P$       4)  $^2D$

30. Укажите терм основного состояния для электронной конфигурации  $d^9$

1)  $^3F$       2)  $^4F$       3)  $^3P$       4)  $^2D$

31. Укажите терм основного состояния для электронной конфигурации  $d^1$

1)  $^3P$       2)  $^2F$       3)  $^2D$       4)  $^3F$

32. Для каких электронных конфигураций квантовое число спин-орбитального взаимодействия  $J = S$

1)  $p^3$       2)  $d^5$       3)  $p^5$       4)  $s^2d^1$

33. На какие АО разрешен переход электрона натрия ( $3S_1$ )

1)  $3p$       2)  $4p$       3)  $4S$       4)  $3d$

34. Для каких электронных конфигураций квантовое число спин-орбитального взаимодействия  $J = L - S$

1)  $p^5$       2)  $d^4$       3)  $p^2$       4)  $s^2d^6$

35. Какова степень вырождения терма при данном  $J$

1)  $J$       2)  $J^2$       3)  $2J$       4)  $2J+1$

36. Сколько полос поглощения дадут атомы скандия ( $4S^23d^1$ ), проходя через слабое магнитное поле

1) 4      2) 3      3) 2      4) 1

36. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля позволяет рассчитывать

- 1) энергии молекулярных орбиталей
- 2) электронные плотности
- 3) геометрию молекулы

4) симметрию молекулы

37. В методе Хюккеля

- 1) пренебрегают двухэлектронными кулоновскими интегралами
- 2) пренебрегают двухэлектронными обменными интегралами
- 3) используется приближение самосогласованного поля
- 4) фиксируют значения матричных элементов фокиана

38. Число узлов ВЗМО бутадиена в расчёте методом Хюккеля равно:

- 1) 4
- 2) 2
- 3) 1
- 4) 3

39. Число занятых МО в расчете молекулы нафталина методом молекулярных орбиталей Хюккеля равно

- 1) 8
- 2) 6
- 3) 5
- 4) 10

40. Число узлов ВЗМО бутадиена в расчёте методом Хюккеля равно

- 1) 1
- 2) 0
- 3) 2
- 4) 3

41. Число узлов НСМО бутадиена в расчёте методом Хюккеля равно

- 1) 3
- 2) 0
- 3) 1
- 4) 2

42. Число узлов ВСМО бутадиена в расчёте методом Хюккеля равно

- 1) 3
- 2) 2
- 3) 1
- 4) 4

43. Как называется интеграл  $\hat{J} = e \int \int \psi_i^2(i) r_{ij}^{-1} \psi_j^2(j) d\tau_1 d\tau_2$ ?

- 1) обменным
- 2) кулоновским
- 3) резонансным
- 4) Интегралом перекрывания

44. Волновая функция МО углеводорода найдена в виде:

$\psi_j = 0,707\varphi_3 - 0,707\varphi_4$ . Вычислите орбитальную

энергию  $E_j = \int \psi_j \hat{H} \psi_j dv$

- 1)  $E_j = \alpha + 0,3\beta$
- 2)  $E_j = \alpha + \beta$
- 3)  $E_j = \alpha - 0,3\beta$
- 4)  $E_j = \alpha - \beta$

45. Волновая функция МО углеводорода в методе МОХ найдена в виде:

$\varphi_j = 0,506\varphi_1 - 0,749\varphi_2 + 0,302(\varphi_3 + \varphi_4)$ . Вычислите орбитальную энергию

$E_j = \int \psi_j \hat{H} \psi_j dv$

- 1)  $E_j = \alpha - 1,481\beta$
- 2)  $E_j = \alpha + 1,481\beta$
- 3)  $E_j = \alpha + \beta$
- 4)  $E_j = \alpha - \beta$



$$1) \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(2\varphi_1 + \varphi_3 + 2\varphi_5)$$

$$2) \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\varphi_1 + \varphi_3 + \varphi_5)$$

$$3) \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4 + \varphi_5)$$

$$4) \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\varphi_1 - \varphi_3 - \varphi_5)$$

52. Волновая функция МО линейного полиена в методе МОХ найдена в виде  $\psi_j = 0,37\psi_1 + 0,60\psi_2 + 0,60\psi_3 + 0,37\psi_4$ . Чему равна орбитальная энергия

$$E_j = \int \psi_j \hat{H} \psi_j d\nu ?$$

$$1) E_j = \alpha - 1,618\beta$$

$$2) E_j = \alpha + 1,618\beta$$

$$3) E_j = \alpha \pm 0,618\beta$$

$$4) E_j = 0,618\beta$$

53. Используя метод молекулярных орбиталей (МО), определите частицу с наибольшей энергией химической связи среди  $CN^-$ ,  $CN^+$  и  $CN$

$$1) CN^+$$

$$2) CN^-$$

$$3) CN$$

$$4) CN^{\cdot}$$

54. Молекулярная орбиталь это

1) область пространства, в которой вероятность локализации электрона равна 95 %

2) область пространства, в которой электрон проводит более 90 % времени

3) одноэлектронная волновая функция, получаемая при решении уравнений Хартри-Фока

55. Химическая связь в ионе  $O_2^+$  по сравнению с молекулой  $O_2$  и в ионе  $N_2^+$  по сравнению с молекулой  $N_2$

1) в  $O_2^+$  менее прочная и в  $N_2^+$  более прочная

2) в обоих ионах более прочная

3) в обоих - менее прочная

4) в  $O_2^+$  более прочная и в  $N_2^+$  менее прочная

56. Для одной МО бутадиена найдена

$$\varphi = 0,602\varphi_1 + 0,372\varphi_2 - 0,372\varphi_3 - 0,602\varphi_4.$$

Вычислите для нее орбитальную энергию

$$1) E = \alpha$$

$$2) E = \alpha - 1,618\beta$$

$$3) E = \alpha + 1,618\beta$$

$$4) E = \beta$$

### **Примерные темы рефератов**

1. Основные этапы развития квантовой механики.

2. Квантово - механические операторы физических величин.
  3. Коммутационные соотношения операторов физических величин.
  4. Одномерные задачи квантовой механики.
  5. Решение уравнения Шредингера для центросимметричной задачи в сферических координатах.
  6. Сферические гармоники.
  7. Атомные орбитали.
  8. Расчет средних энергий и радиусов орбиталей.
  9. Принципы построения периодической системы элементов как следствия из решения уравнения Шредингера.
  10. Многоэлектронные атомы. Метод Хартри.
  11. Метод Хартри-Фока. Орбитали Слетера.
  12. Термы атомов. Мультиплетная структура термов.
  13. Приближенные методы квантовой механики.
  14. Метод молекулярных орбиталей.
  15. Простой и расширенный методы Хюккеля.
  16. Полуэмпирические методы квантовой механики.
  17. Электронные параметры атомов и связей.
  18. Метод возмущений на основе метода МОХ.
  19. Индексы реакционной способности молекул.
  20. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических реакциях.
- Теория Вудвода-Хоффмана.
21. Теория кристаллического поля.
  22. Теория поля лигандов.
  23. Симметрия молекулярных орбиталей.
  24. Полуэмпирические методы квантовой химии.

### **7.3. Методические материалы, определяющие процедуру оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Общий результат выводится как интегральная оценка, складывающаяся из текущего контроля - 70% и промежуточного контроля - 30%.

Текущий контроль по дисциплине включает:

- посещение занятий - 5 баллов,
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ - 35 баллов.

Промежуточный контроль по дисциплине включает:

- устный опрос - 30 баллов,
- письменная контрольная работа - 30 баллов,
- тестирование - 30 баллов.

### **8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.**

#### **а) основная литература:**

1. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия [Текст]. М.: Мир, 2001.

2. Шабанов О.М. Математические основы квантовой химии [Текст]. - Махачкала, 2003.
3. Шабанов О.М., Пиняскин В.В. Полуэмпирические методы квантовой химии [Текст]. Учебно-методическое пособие. ИПЦ ДГУ. 2009 г. 50 с.
4. Елютин, П.В. Квантовая механика с задачами / П.В. Елютин, В.Д. Кривченков. - Москва: Физматлит, 2001. - 300 с. - ISBN 978-5-9221-0077-9; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68967>

**б) дополнительная литература:**

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория [Текст]. – М.: 1989.
2. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул [Текст]. – Ростов-Дон: Феникс, 1997.
3. Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия [Текст]. – М.: Изд-во МГУ, 1991.
4. Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков [Текст]. – Изд. Воронежского университета, 1974

**9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины**

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: электронная библиотека / Науч. электрон. б-ка. - Москва, 1999 - . Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp>
2. Moodle [Электронный ресурс]: система виртуального обучения: [база данных] / Даг. гос. ун-т. – Махачкала, г. – Доступ из сети ДГУ или, после регистрации из сети ун-та, из любой точки, имеющей доступ в интернет. – URL: <http://moodle.dgu.ru>
3. Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный ресурс]: база данных содержит сведения о всех видах лит, поступающих в фонд НБ ДГУ/Дагестанский гос. ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>
4. ЭБС ibooks.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <https://ibooks.ru/>
5. ЭБС book.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: [www.book.ru/](http://www.book.ru/)
6. ЭБС iprbook.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31168.html>

**10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.**

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Методические указания должны

мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- гlossарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций,
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой;
- поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций ситуации;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

|                                              |                                              |
|----------------------------------------------|----------------------------------------------|
| Разделы и темы для самостоятельного изучения | Виды и содержание для самостоятельной работы |
|----------------------------------------------|----------------------------------------------|

|                                                                                                                                                                                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Раздел 1. Математический аппарат квантовой механики<br>Тема 1. Операторы, их свойства. Свойства эрмитовых операторов                                                                                              | Выучить определения. Освоить свойства операторов. Самосопряженные линейные операторы. Операторы дифференцирования, вещественные и мнимые.                                                                                                                        |
| Тема 2. Постулаты квантовой механики                                                                                                                                                                              | Постулаты квантовой механики. Свойства волновых функций. Построение операторов физических величин. Вычисление средней энергии системы.                                                                                                                           |
| Тема 3. Полное и стационарное уравнения Шредингера                                                                                                                                                                | Получить гамильтониан. Разделите полное уравнение Шредингера на стационарное и временное. В каких случаях они применяются?                                                                                                                                       |
| Тема 4. Одномерные задачи квантовой химии                                                                                                                                                                         | Решить уравнения для свободной частицы, частицы в одномерной потенциальной яме. Движение частицы к потенциальному барьеру. Жесткий ротатор. Гармонический осциллятор.                                                                                            |
| Раздел 2. Решение уравнение Шредингера для водородоподобного атома. Многоэлектронные атомы<br>Тема 1. Разделение переменных и решение ур. Шредингера.                                                             | Разделение уравнения в сферических координатах, получение $R_{n,l}(r)$ , $Q(q)$ - и $\Phi(\varphi)$ -уравнений. Анализ их решений..                                                                                                                              |
| Тема 2. Атомные орбитали. Графическое Представление функций $R(r)$ и $Y(Q, \varphi)$ .                                                                                                                            | Построить графики зависимости функций $R_{n,l}(r)$ , $R_{n,l}^2(r)$ и $4\pi r^2 R_{n,l}^2$ от $r$ . Расстояние наиболее вероятного нахождения электрона различных АО                                                                                             |
| Тема 3. Энергии, средние и наиболее вероятные радиусы АО.                                                                                                                                                         | Вычисление среднего и наиболее вероятных значений $r$ энергии водородоподобных атомов (ионов).                                                                                                                                                                   |
| Тема 4. Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока. Термы атомов                                                                                                                                                   | Гамильтониан многоэлектронных атомов. Усреднение отталкивания электронов и процедура самосогласования. Вычислить термы состояния различных атомов.                                                                                                               |
| Раздел 3. Приближенные методы решения квантово-механических задач для молекул<br>Тема 1. Теория возмущений при отсутствии и наличии вырождения                                                                    | Теория возмущений при отсутствии и наличии вырождения. Энергии МО нулевого, первого и второго приближений.                                                                                                                                                       |
| Тема 2. Вариационный метод. Метод МО ЛКАО                                                                                                                                                                         | Вариационная теорема. Вариационный метод. Получение уравнений Рутаана                                                                                                                                                                                            |
| Тема 3. $\pi$ -сопряженные системы молекул                                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| Тема 4. Электронные параметры атомов и связей                                                                                                                                                                     | Вычисление электронных плотностей, порядков связей, индексов свободной валентности.                                                                                                                                                                              |
| Раздел 4. Индексы реакционной способности молекул Сохранение орбитальной симметрии. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов.<br>Тема 1 Индексы реакционной способности молекул и направление реакций. | Электронные плотности, порядки связей, индексы свободной валентности, коэффициенты атомов граничных молекулярных орбиталей как ИРС.. Определите направления атак $R^+$ , $R^-$ , $R^\cdot$ . Альтернантные и неальтернантные молекулы Роль граничных орбиталей.. |

|                                                                     |                                                                                                                                                       |
|---------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Тема 2. Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях      | Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклообразования, циклоприсоединения и сигматропных реакциях. Реакции $4q$ и $4q+2$ .                     |
| Тема 3. Расщепление d-уровня в комплексах. Строение координационных | Расщепление d-АО в поле лигандов различной симметрии. ЭСКП в октаэдрических и тетраэдрических комплексах. Магнитные свойства комплексов               |
| Тема 4. Теория поля лигандов. Правило 18 электронов                 | Теория поля лигандов. Групповые орбитали, их симметрия в соответствии с d-орбиталями металла. Молекулярные орбитали комплексов. Правило 18 электронов |

# **11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем.**

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине «Квантовая химия» используются следующие информационные технологии:

1. Программа для ЭВМ Microsoft Imagine Premium, 3 years, Renewal.

Производитель: Microsoft Corporation Товарный знак: Майкрософт

Корпорейшн (Microsoft®) Страна происхождения: Ирландия. Контракт №188-ОА, «21» ноября 2018 г.

2. Acrobat Professional 9 Academic Edition и Acrobat Professional 9 DVD Set Russian Windows ГК №26-ОА от «07» декабря 2009 г

3. Avogadro 1.2.0n ПО для визуализации данных квантово-химических расчетов – свободный доступ

# **12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.**

В соответствии с требованиями ФГОС ВО кафедра имеет специально оборудованную учебную аудиторию для проведения лекционных занятий, которая укомплектована техническими средствами обучения (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком).

Пакет программ «HyperChem» для проведения полуэмпирических, квантовохимических расчетов молекулярных систем. Пакет программ для проведения ab-initio квантовохимических расчетов молекулярных систем в рамках метода ДВ МО ЛКАО.