

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

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Кафедра физической и органической химии
химического факультета

Образовательная программа магистратуры
04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:
Аналитическая химия

Форма обучения: **Очная**

Статус дисциплины: входит в обязательную часть ОПОП

Махачкала, 2022 г.

Рабочая программа дисциплины «Квантовая химия и квантовая механика» составлена в 2022 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО - магистратура по направлению подготовки 04.04.01 Химия от «13» июня 2017г. № 652.

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

Рабочая программа дисциплины одобрена: на заседании кафедры физической и органической химии от «26» 02 2022г., протокол № 6.

Зав. кафедрой  проф. Абдулагатов И.М.
(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета от «18» 03 2022г., протокол № 7.

Председатель  Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим управлением «31» 03 2022г.

Начальник УМУ  Гасангаджиева А.Г.

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия» входит в обязательную часть ОПОП магистратуры по направлению 04.04.01 Химия.

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической химии. Содержание дисциплины охватывает операторный аппарат квантовой механики и его применение для строения атомов, молекул, построения молекулярных орбиталей и анализа механизмов химических реакций. Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций: ОПК-1.

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 *экзамена*.

Объем дисциплины 5 зачетных единиц, в том числе в академических часах по видам учебных занятий

Се- местр	Учебные занятия							Форма про- межуточной аттестации
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Все- го	из них					СРС, в том числе экза- мен	
Лек- ции		Лабора- торные за- нятия	Практиче- ские заня- тия	КСР	Консуль- тации			
1	180	18		32			94+36	Экзамен

1. Цели освоения дисциплины

Курс «Квантовой механики и 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 химических реакций.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия» входит в обязательную часть ОПОП магистратуры по направлению 04.04.01 Химия.

В информационном и логическом планах дисциплина «Квантовая механика и 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 механика и 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 и наименование компетенции из ОПОП	Код и наименование индикатора достижения компетенций (в соответствии с ОПОП)	Планируемые результаты обучения	Результаты обучения
<p>ОПК-1. Способен использовать при решении задач профессиональной деятельности понимание теоретических основ специальных и междисциплинарных разделов химии, физики и механики материалов.</p>	<p>ОПК-1.1. Воспринимает информацию химического содержания, систематизирует и анализирует ее, выявляет ошибочные суждения и логические противоречия, опираясь на знание теоретических основ фундаментальных разделов химии</p>	<p>Знает: теоретические основы расчетно-экспериментальных методов исследования в неорганической химии. Умеет: выполнять эксперимент, проводить расчеты и теоретические обоснования полученных данных. Владеет: навыками расчетов, использования современных приборов программного обеспечения и использования баз данных в области неорганической химии.</p>	<p>Семинар, письменный опрос</p>
	<p>ОПК-1.2. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных расчетно-теоретических работ химической направленности</p>	<p>Знает: теоретические и экспериментальные методы исследования в области неорганической химии. Умеет: формулировать заключения и выводы по результатам исследования. Владеет: методами программного обеспечения и использования расчетных и графических программ по неорганической химии.</p>	<p>Семинар, письменный опрос</p>

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 академических часов.

4.2. Структура дисциплины

№	Разделы и темы дисциплины	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра). Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия		
Модуль 1. Математический аппарат квантовой механики							
1	Операторы квантовой механики. Эрмитовы операторы. Уравнения Шредингера	1	2	4		12	Устный опрос, тестирование
2	Одномерные задачи квантовой механики.	1	2	4		12	Устный опрос, тестирование
<i>Итого по модулю 1</i>		36	4	8		24	Коллоквиум
Модуль 2. Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Многоэлектронные атомы							
1	Разделение переменных и решение уравнения Шредингера.	1	2	4		12	Устный опрос, тестирование
2	Атомные орбитали. Энергии, средние и наиболее вероятные радиусы АО. Многоэлектронные атомы. Термы атомов	1	2	4		12	Устный опрос, тестирование
<i>Итого по модулю 2</i>		36	4	8		24	Коллоквиум
Модуль 3. Приближенные методы решения квантово-механических задач для молекул							
1	Теория возмущений. Вариационный метод. Метод МО ЛКАО	1	2	4		8	Устный опрос, тестирование
2	Симметрия молекулярных си-	1	2	2		8	Устный опрос, те-

	стем						стирование
3	π - сопряженные системы	1	2	2		6	Устный опрос, те- стирование
<i>Итого по модулю 3</i>		36	6	8		22	Коллокви- ум
Модуль 4. Сохранение орбитальной симметрии. Строеие координационных соединений.							
1	Теория кри- сталлического поля. Теория поля лигандов.	1	2	4		12	Устный опрос, те- стирование
2	Индексы реак- ционной спо- собности моле- кул. Сохране- ние орбиталей симметрии в хим. реакцияx	1	2	4		12	Устный опрос, те- стирование
<i>Итого по модулю 4</i>		36	4	8		24	Коллокви- ум
Модуль 5. Подготовка к экзамену							
1	Подготовка к эк- замену					36	Экзамен
<i>Итого</i>		180	18	32		94+36	Экзамен

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам.

4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине

Модуль 1. Математический аппарат квантовой механики

Тема 1. Операторы квантовой механики. Квантово-механические операторы физических величин, оператор Гамильтона. Собственные функции и собственные значения основных квантово-механических операторов. Постулаты квантовой механики. Постулаты квантовой механики. Законы сохранения в квантовой механике. Вектор плотности тока вероятности.

Тема 2. Одномерные задачи квантовой механики. Решение уравнения Шредингера для частицы в одномерной потенциальной яме, движения частицы вдоль одномерного потенциального барьера, линейного гармонического осциллятора. Теория момента импульса. Операторы момента импульса, его проекций и квадрата. Правила коммутации этих операторов. Возможность одновременного определения значений величин, наличия общих систем собственных функций. Движение в центральном поле.

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

Тема 1. Разделение переменных и решение уравнения Шредингера. Разделение переменных в уравнении Шредингера в сферических координатах с получением R -, Q - и Φ -уравнений. Установление соотношений между квантовыми числами. Построение полиномов Лежандра и Лагерра и полных волновых функций для различных состояний (n, l, m) .

Тема 2. Атомные орбитали. Графическое представление $R(r)$ и $Y(Q, \varphi)$. Атомные орбитали. Графическое представление $R(r)$, $R^2(r)$ и $Y(Q, \varphi)$. Энергии, средние и наиболее вероятные радиусы АО. Из полученных в результате решения уравнения Шредингера АО получить средние и наиболее вероятные значения радиусов АО и средних энергий для различных квантовых чисел. Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока. Термы ато-

мов. Многоэлектронные атомы. Метод СПИ Хартри. Уравнение Хартри. Метод Хартри-Фока. Термы многоэлектронных атомов. Спектры атомов.

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

Тема 1. Теория возмущений. Вариационный метод. Метод МО ЛКАО. Теория возмущения стационарных состояний при отсутствии и наличия вырождения. Атом водорода и гармонический осциллятор в теории возмущений. Метод возмущения на основе метода МОХ. Вариационный метод. Атом водорода и гармонический осциллятор в вариационном методе.

Тема 2. Симметрия молекулярных систем. Симметрия молекул. Элементы и операции симметрии. Преобразования симметрии. Приводимые представления. Неприводимые преобразования. Характеры НП.

Тема 3. π -сопряженные системы. π -сопряженные системы. Метод МОХ. Линейные полиены. Аннулены. Электронные параметры атомов и связей. Альтернантные и неальтернантные углеводороды. Полуэмпирические методы квантовой механики. Полуэмпирические методы квантовой химии. Метод CNDO и INDO.

Модуль 4. Сохранение орбитальной симметрии. Строение координационных соединений

Тема 1. Теория кристаллического поля. Теория поля лигандов. Теория кристаллического поля. Расщепление d-уровня в октаэдрическом и тетраэдрическом полях лигандов. Теория поля лигандов. МО комплексов.

Тема 2. Индексы реакционной способности. Индексы реакционной способности. Электронные заряды, индексы свободной валентности, граничные орбитали. Приближения изолирующей и реагирующей молекул. Сохранение орбитальной симметрии в переклещиваемых реакциях. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения, циклообразования и циклотропных реакциях.

Модуль 5. Подготовка к экзамену

4.3.2. Содержание лабораторно-практических занятий по дисциплине

Модуль 1. Математический аппарат квантовой механики

Тема 1. Операторы квантовой механики. Эрмитовы операторы. Уравнения Шредингера.

Практическое занятие 1. Кризис классической физики. Теория Бора. Операторы. Квантово-механические операторы физических величин. Операторы момента импульса и его проекций. Коммутационные соотношения. Полное уравнение Шредингера. Вектор плотности тока вероятности. Законы сохранения в квантовой механике.

Вопросы к теме:

1. В каких экспериментальных результатах выразился кризис классической физики?
2. Как выражаются соотношения между квантово-механическими операторами физических величин?
3. Какое условие должно выполняться, чтобы две физические величины имели одновременно определенные значения?

Тема 2. Одномерные задачи квантовой механики.

Практическое занятие 2. Движение частицы в одномерной потенциальной яме и вдоль одномерного потенциального барьера. Анализ решений. Жесткий ротатор. Гармонический осциллятор.

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 частицей в классической и квантовой механике?

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

Тема 1. Разделение переменных и решение уравнения Шредингера.

Практическое занятие 1. Разделение переменных в уравнении Шредингера.

Вопросы к теме:

1. Анализ решений R -, Q - и Φ -уравнений.
2. Атомные орбитали.
3. Графическое представление орбиталей.

Практическое занятие 2. Атомные орбитали. Графическое представление $R(r)$, $R^2(r)$ и $Y(Q, \varphi)$. Принципы построения периодической системы элементов.

Тема 2. Вычисление средних энергий и радиусов атомных орбиталей.

Практическое занятие 2. Вычисление средних энергий и радиусов $1s$ - и $2s$ - АО.

Вопросы к теме:

1. Что такое узловые точки (узловые плоскости), при каких квантовых числах они появляются и чему равно их число?
2. От каких квантовых чисел зависит энергия АО?
3. Как соотносятся средние и наиболее вероятные значения радиусов АО?
4. Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока.
5. Принцип Паули. Определители Слэтера для атомов водорода и лития.
6. Спин-орбитальное взаимодействие. Термы атомов. Мультиплетность термов. Электронные спектры атомов.

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

Тема 1. Теория возмущений. Вариационный метод. Метод МО ЛКАО.

Практическое занятие 1. Теория возмущений при отсутствии и наличии вырождения. Атом гелия и ангармонический осциллятор в теории возмущений. Вариационный принцип. Метод МО ЛКАО. Уравнения Рутана.

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. Симметрия молекулярных систем. Теория групп симметрии. **Практическое занятие 2.** Элементы и операции симметрии. Точечные группы. Представления групп. Таблицы характеров НП групп.

Вопросы к теме:

1. Какие элементы симметрии имеет молекула диборана?
2. Сколько классов сопряженных операций симметрии содержится в точечных группах молекул сульфурилхлорида и фосфина?
3. Каков НП прямого произведения НП V_1 и V_2 точечной группы C_{2v} ?

Тема 3. π -сопряженные системы.

Практическое занятие 3. π -сопряженные системы.

Вопросы к теме:

1. π -сопряженные системы. Метод МОХ.
2. Линейные полиены. Аннулены.
3. Электронные параметры атомов и связей.
4. Альтернантные и неальтернантные углеводороды.
5. Полуэмпирические методы квантовой механики. Полуэмпирические методы квантовой химии. Метод CNDO и INDO.

Модуль 4. Сохранение орбитальной симметрии. Строение координационных соединений

Тема 1. Теория кристаллического поля. Теория поля лигандов.

Практическое занятие 1. Теория кристаллического поля. Теория поля лигандов.

Вопросы к теме:

1. Расщепление d-уровня в комплексах октаэдрической и тетраэдрической симметрии.
2. Комплексы сильного и слабого полей лигандов.
3. Стабилизация кристаллическим полем. Эффект Яна-Теллера.
4. Применение метода МО ЛКАО к комплексным соединениям. Теория поля лигандов.
5. Чему равна энергия стабилизации кристаллическим полем в случае гексацианидного комплекса Fe^{2+} ?
6. Чему равна энергия стабилизации кристаллическим полем в случае тетрахлоридного комплекса Fe^{3+} ?
7. В чем содержится правило 18 электронов в октаэдрических комплексах?

Тема 2. Индексы реакционной способности молекул. Сохранение орбиталей симметрии в химических реакциях.

Практическое занятие 2. Электронные плотности, порядки связей, индексы свободной валентности параметры граничных орбиталей - как индексы реакционной способности молекул. Электрофильные, нуклеофильные и радикальные механизмы замещения и присоединения.

Вопросы к теме:

1. Какими индексами определяется направление атаки электрофильными, нуклеофильными и радикальными агентами?
2. Что такое энергия локализации в приближении изолированной молекулы?
3. В каких реакциях замещения играют решающую роль граничные МО?

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 теме 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 экзамену.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методическое обеспечение
1	Изучение рекомендованной литературы	Устный опрос по разделам дисциплины	См. разделы 7.1, 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 7.1, 8, 9 данного документа
3	Решение задач	Проверка домашних задач	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
4	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
5	Подготовка к экзамену	Устный опрос, либо компьютерное тестирование	См. разделы 7.1, 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. Типовые контрольные задания

Контрольные вопросы к экзамену

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 P_x , P и 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 -, Q - и Φ -уравнений для атома водорода. Квантовые числа.
22. Сферические гармоники, их нормирование.
23. Квантовые числа. Атомные орбитали. Графики зависимости R , R^2 и $4\pi r^2 R^2$ от r при $n=1, 2$.
24. Решение уравнения Шредингера для гармонического осциллятора. Построить ψ_0 , ψ_1 и ψ_3 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 ϵ_{aa} , ϵ_{ab} и S_{ab} .
39. Метод МО на примере молекулы C–C–C.
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.
49. Индексы реакционной способности. Приближение реагирующей молекулы σ - и π -комплексы.
50. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических химических реакциях. Реакции циклоприсоединения, циклообразования, сигматропные.
51. Обобщенное правило Вудворда-Хоффмана. Роль граничных орбиталей.
52. Теория кристаллического поля. Расщепление d-уровней в тетраэдрическом и октаэдрическом комплексах.
53. Теория кристаллического поля. ЭСКП: октаэдрический комплекс слабого поля.
54. Энергия стабилизации кристаллическим полем.
55. Октаэдрический комплекс сильного поля. ЭСКП.
56. Теория кристаллического поля. Тетраэдрический комплекс слабого поля.
57. Эффект Яна-Теллера.
58. Теория поля лигандов. МО октаэдрического комплекса. Правило 18 электронов.
59. Приближенные методы ССП. Методы ППДП и ЧПДП. Параметризация в методах.
60. Введение конфигурационного взаимодействия в рамках методов дифференциального перекрывания. Метод Парра-Попла-Паризера.

Примерные тестовые задания

- Чему равна длина волны де Бройля, связанная с электроном, ускоренным под действием разности потенциалов 100 В?
 - 1.22 пм
 - 999 нм
 - 1.22 нм
 - 122 пм
- Чему равна вероятность нахождения 1s-электрона атома водорода внутри небольшой сферы объемом 1 пм^3 с центром в ядре?
 - $2.14 \cdot 10^{-4}$
 - $2.14 \cdot 10^{-6}$
 - $2.14 \cdot 10^{-3}$
 - $2.14 \cdot 10^{-5}$
- Волновая функция $\Psi(x, t)$ должна быть
 - действительной
 - дифференцируемой
 - антисимметричной
 - положительной
- Общие требования к волновой функции. Волновая функция $\Psi(x, t)$ должна быть
 - определенной во всей области изменения переменных;
 - конечной
 - однозначной
 - неотрицательной
- В квантовой механике одновременно не могут быть определены с любой точностью
 - импульс и энергия
 - координаты и скорость
 - импульс и координаты
 - энергия и время
- Собственные значения эрмитова оператора всегда
 - комплексные
 - образуют непрерывный спектр
 - действительны

- 4) положительные
7. Для линейного оператора A верно
- 1) $Af_1f_2 = Af_1 + Af_2$ 2) $Aaf = aAf$ 3) $A(f_1 + f_2) = (Af_1)(Af_2)$
- 4) $A(a_1f_1 + a_2f_2) = a_1Af_1 + a_2Af_2$
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 $\nabla_{\varrho, \varphi}^2$ 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) 1 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
13. Как функция является решением θ -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) ϑ и φ 2) n и l 3) l и m 4) n и S
15. При каких значениях углов ϑ и φ 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 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 ϑ)
- 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 множитель $R_{n,l}$ 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. Укажите терм основного состояния для электронной конфигурации d^2
- 1) 3P 2) 4F 3) 3F 4) 2D
25. Укажите терм основного состояния для электронной конфигурации d^8
- 1) 4F 2) 3F 3) 3P 4) 2D
26. Укажите терм основного состояния для электронной конфигурации d^9
- 1) 3F 2) 4F 3) 3P 4) 2D
27. Укажите терм основного состояния для электронной конфигурации d^1
- 1) 3P 2) 2F 3) 2D 4) 3F
28. Для каких электронных конфигураций квантовое число спин-орбитального взаимодействия $J = S$
- 1) p^3 2) d^5 3) p^5 4) s^2d^1
29. На какие АО разрешен переход электрона натрия ($3S_1$)
- 1) $3p$ 2) $4p$ 3) $4s$ 4) $3d$
30. 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

Примерные темы рефератов

1. Основные этапы развития квантовой механики.
2. Квантово-механические операторы физических величин.
3. Коммутационные соотношения операторов физических величин.
4. Теория момента импульса.
5. Одномерные задачи квантовой механики.
6. Законы сохранения в квантовой механике.
7. Вывод оператора Лапласа в сферических координатах.
8. Дифференциальные уравнения на полиномы Лежандра.
9. Дифференциальные уравнения на полиномы Лагерра.
10. Дифференциальные уравнения на полиномы Чебышева-Эрмита.
11. Решение уравнения Шредингера для центросимметричной задачи в сферических координатах.
12. Сферические гармоники.
13. Атомные орбитали.
14. Расчет средних энергий и радиусов орбиталей.
15. Принципы построения периодической системы элементов как следствия из решения уравнения Шредингера.
16. Многоэлектронные атомы. Метод Хартри.
17. Метод Хартри-Фока. Орбитали Слетера.
18. Термы атомов. Мультиплетная структура термов.
19. Приближенные методы квантовой механики.
20. Метод молекулярных орбиталей.

21. Простой и расширенный методы Хюккеля.
22. Полуэмпирические методы квантовой механики.
23. Электронные параметры атомов и связей.
24. Метод возмущений на основе метода МОХ.
25. Индексы реакционной способности молекул.
26. Сохранение орбитальной симметрии в перicyклических реакциях. Теория Вудвода-Хоффмана.
27. Теория кристаллического поля.
28. Теория поля лигандов.
29. Расщепление термов d^n -конфигураций.
30. Симметрия молекулярных орбиталей.
31. Применение проекционных операторов для построения орбиталей симметрии в базисе атомных орбиталей.
32. Теория граничных орбиталей Фукуи.
33. Полуэмпирические методы квантовой химии.

7.2. 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) адрес сайта курса

Moodle [Электронный ресурс]: система виртуального обучения: [база данных] / Даг. гос. ун-т. – г. Махачкала, – Доступ из сети ДГУ или, после регистрации из сети ун-та, из любой точки, имеющей доступ в интернет. – URL: <http://moodle.dgu.ru/>

б) основная литература

1. Степанов, Николай Федорович. Квантовая механика и квантовая химия [Текст]: учеб. для студ. хим. фак. ун-тов / Степанов, Николай Федорович. – М.: Мир: Изд-во МГУ, 2001. – 519 с. – (Теоретические основы химии). – ISBN 5-03-00341-5-0-0.
2. Шабанов, Осман Мехтиевич. Математические начала квантовой химии [Текст]: учеб. пособие для хим. фак. ун-тов / Шабанов, Осман Мехтиевич. – Махачкала: [Эпоха], 2003. – 310 с.: ил. – Допущено УМО РФ. – ISBN 5-7788-0380-X: 120-00
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>

в) 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. Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков [Текст]. – Изд. Воронежского университета, 1980.
4. Киселёв, В.В. Квантовая механика: курс лекций / В.В. Киселёв. – Москва: МЦН-МО, 2009. – 560 с. – ISBN 978-5-94057-497-2; То же [Электронный ресурс]. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=62965>

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> – Яз. рус., англ.
2. Moodle [Электронный ресурс]: система виртуального обучения: [база данных] / Даг. гос. ун-т. – г. Махачкала, – 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. – г. Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>, свободный.
4. Пакет программ «HyperChem» для проведения полуэмпирических, квантовохимических расчетов молекулярных систем.
5. Пакет программ для проведения ab-initio квантовохимических расчетов молекулярных систем в рамках метода ДВ МО ЛКАО.
6. Пакет программ для проведения полуэмпирических зонных квантовохимических расчетов кристаллических систем в приближении метода РМХ.
7. ЭБС ibooks.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <https://ibooks.ru/>
8. ЭБС book.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: www.book.ru/
9. 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;
- глоссарий (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
Модуль 1. Математический аппарат квантовой механики. Решение уравнения Шредингера для одномерных моделей	Выучить определения. Освоить свойства операторов. Самосопряженные линейные операторы. Операторы дифференцирования, вещественные и мнимые.
Модуль 2. Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Многоэлектронные атомы	Решить уравнения для свободной частицы, частицы в одномерной потенциальной яме. Движение частицы к потенциальному барьеру. Жесткий ротатор. Гармонический осциллятор. Разделение уравнения в сферических координатах. Анализ их решений. Гамильтониан многоэлектронных атомов. Усреднение отталкивания отталкивание электронов и процедура самосогласования

<p>Модуль 3. Приближенные методы решения квантово-механических задач для молекул</p>	<p>Метод теории возмущений. Вариационная теорема. Вариационный метод. Метод МО ЛКАО. Метод МО Хюккеля. Допущения. Решение задач для линейных и циклических полиенов. Вычисление электронной плотности на атомах, порядков связей, индексов свободной валентности. Определить элементы и операции симметрии молекул с различным числом стереоактивных электронных пар. Определение элементов и операций симметрии этих молекул. Точечные группы симметрии молекул. Дипольный момент квантовых переходов. Правила переходов в МК-, ИК-, КР- и УФ-спектроскопии</p>
<p>Модуль 4. Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях. Строение координационных соединений</p>	<p>Электронные параметры, атомов и граничных орбиталей как ИРС. Определить механизмы электрофильного, нуклеофильного и радикального замещения. Теория Вудворда-Хоффмана. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклообразования, циклоприсоединения и сигматропных реакциях. Реакции $4q$ и $4q+2$. Расщепление d-АО в поле лигандов различной симметрии. ЭСКП в октаэдрических и тетраэдрических комплексах. Теория поля лигандов</p>

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 механика и 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 квантово-химических расчетов молекулярных систем в рамках метода ДВ МО ЛКАО.