

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова**

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А.Маракаев

« 24 » мая 2022 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**«Основы квантовой механики и квантовой химии»**

Направление подготовки  
04.03.01 Химия

Направленность (профиль)  
«Медицинская и фармацевтическая химия»

Форма обучения  
очная

Программа одобрена  
на заседании института  
от 14 апреля 2022 г., протокол № 8

Программа одобрена НМК  
факультета биологии и экологии  
протокол № 8 от 18 апреля 2022 г.

Ярославль

### 1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование у студентов современных представлений об основных постулатах и математическом аппарате квантовой механики, приближенных методах решения квантово-механических задач, основных положениях квантовой химии, неэмпирических и полуэмпирических методах изучения электронного строения атомов и молекул, качественной теории реакционной способности.

### 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока 1 (Б1.В.06).

Для освоения данной дисциплины студенты должны знать основы общей химии, владеть математическим аппаратом линейной алгебры, дифференциального исчисления, уметь решать основные типы дифференциальных уравнений.

Знания и навыки, полученные при изучении дисциплины, необходимы для изучения последующих дисциплин «Компьютерное моделирование молекулярных систем и взаимодействия в биологических системах», «Методы моделирования при создании лекарственных средств», для выполнения выпускной работы и в научно-исследовательской деятельности.

### 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ООП ВО и приобретения следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

<b>Формируемая компетенция (код и формулировка)</b>	<b>Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)</b>	<b>Перечень планируемых результатов обучения</b>
<b>Профессиональные компетенции</b>		
<b>ПК-1</b> Способен проводить НИР и НИОКР, выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.	<b>ПК-1.1</b> Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР.	<b>Знать:</b> – основные постулаты и математический аппарат квантовой механики; - основные положения квантовой химии. <b>Уметь:</b> – применять фундаментальные понятия квантовой механики при решении модельных и прикладных химических задач. <b>Владеть навыками:</b> – составления входных файлов для проведения в квантово-химической программе Firefly.

	<p><b>ПК-1.3</b> Выбирает технические средства реализации и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР.</p>	<p><b>Знать:</b> – неэмпирические и полуэмпирические методы расчета молекул; – базисные наборы для неэмпирических расчетов; – методы учета электронной корреляции. <b>Уметь:</b> – подбирать метод расчета и базис для получения адекватных результатов в рамках поставленной задачи при разумных затратах вычислительных ресурсов; <b>Владеть навыками:</b> – работы в квантово-химической программе Firefly.</p>
	<p><b>ПК-1.5</b> Обрабатывает результаты экспериментальных и теоретических исследований.</p>	<p><b>Уметь:</b> – анализировать электронное строение молекул. <b>Владеть навыками:</b> – определения основных расчетных параметров электронного и геометрического строения молекул по результатам расчетов; – подготовки отчетов по результатам проведенных квантово-химических расчетов.</p>
<p><b>ПК-2</b> Способен осуществлять разработку методов получения и контроля соединений с целевыми характеристиками под руководством специалиста более высокой квалификации.</p>	<p><b>ПК-2.4</b> Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов.</p>	<p><b>Знать:</b> – квантово-химические теории реакционной способности. <b>Уметь:</b> – осуществлять неэмпирические и полуэмпирические расчеты электронного строения атомов и молекул. <b>Владеть навыками:</b> – оценки реакционной способности на основе результатов квантово-химических расчетов.</p>

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 акад.ч.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Формы текущего контроля успеваемости  Форма промежуточной аттестации (по семестрам)  Формы ЭО и ДОТ (при наличии)
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Введение.	4	2					2	Опрос
2	Основы квантовой механики. Строение атомных ядер	4	8			1		10	Опрос, тест
	<i>в том числе с ЭО и ДОТ</i>							2	Промежуточный тест №1 ЭУК в LMS Moodle
3	Квантовая химия. Методы решения молекулярной задачи.	4	8		12	1		12	Опрос, тест, отчеты по лабораторным работам
	<i>в том числе с ЭО и ДОТ</i>							2	Промежуточный тест №2 ЭУК в LMS Moodle
4	Полуэмпирические и неэмпирические методы квантовой химии	4	12		18	3		12	Опрос, тест, отчеты по лабораторным работам, контрольная работа
	<i>в том числе с ЭО и ДОТ</i>							2	Промежуточный тест №3 ЭУК в LMS Moodle
5	Применение квантовой химии. Теории реакционной способности	4	6		55	4		14	Опрос, отчеты по лабораторным работам, контрольная работа, итоговый тест
	<i>в том числе с ЭО и ДОТ</i>							8	Промежуточный тест №4 Итоговый тест ЭУК в LMS Moodle
						2	0,5	33,5	Экзамен
	<b>ИТОГО</b>		<b>36</b>		<b>85</b>	<b>11</b>	<b>0,5</b>	<b>83,5</b>	

#### 4.1 Информация о реализации дисциплины в форме практической подготовки

##### Информация о разделах дисциплины и видах учебных занятий, реализуемых в форме практической подготовки

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Формы текущего контроля успеваемости Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
3	Квантовая химия. Методы решения молекулярной задачи.	4			12				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
4	Полуэмпирические и неэмпирические методы квантовой химии	4			18				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
5	Применение квантовой химии. Теории реакционной способности	4			55				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
	<b>ИТОГО</b>				<b>85</b>				

#### Содержание разделов дисциплины

##### 1. Введение

1.1. Место квантовой механики в современной науке. Предпосылки возникновения квантовой механики. Модели атомов по Резерфорду и Бору. Корпускулярно-волновой дуализм. Волновая и матричная механики.

1.2. Аппарат линейной алгебры (краткая сводка). Матрицы, определители, операторы. Функциональные пространства. Собственные значения и собственные функции операторов.

##### 2. Основы квантовой механики. Строение атомных ядер

2.1. Постулаты квантовой механики. Волновая функция и ее свойства. Поведение волновой функции в точках разрыва потенциала. Атомная система единиц.

2.2. Свойства операторов в квантовой механике. Собственные значения и собственные функции операторов. Операторы физических величин и соотношения между ними. Коммутация операторов и соотношение неопределенностей.

2.3. Уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера. Эволюция состояний. Уравнение Шредингера для частицы в прямоугольной потенциальной яме. Квантовые эффекты (туннельный эффект, надбарьерное отражение, нулевые колебания) и их проявления в химии.

2.4. Уравнение Шредингера для атома водорода и этапы его решения: отделение центра масс, переход к сферическим координатам, решение уравнения для угловой и радиальной частей. Сферические гармоники и их свойства. Радиальная структура атомных орбиталей. Физический смысл квантовых чисел электрона в атоме водорода.

2.5. Момент импульса электрона в атоме. Понятие о спине. Принцип Паули.

2.6. Свойства многоэлектронных атомов: энергетические уровни электронов и периодичность изменения свойств. Квантовые числа и термы многоэлектронных атомов. Оптические спектры атома водорода и многоэлектронных атомов.

### **3. Квантовая химия. Методы решения молекулярной задачи.**

3.1. Приближенные методы квантовой механики. Вариационный принцип и линейный вариационный метод. Теория возмущений.

3.2. Молекулярное уравнение Шредингера. Упрощения при решении молекулярной задачи. Адиабатическое приближение.

3.3. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри. Способы представления многоэлектронной волновой функции. Метод Хартри-Фока и его разновидности. Теорема Купманса.

3.4. Понятие о методах валентных связей и молекулярных орбиталей. Метод МО ЛКАО. Уравнения Рутаана.

3.5. Основы работы с квантово-химическим пакетом Firefly. Способы задания геометрии, основные ключевые слова, интерпретация и визуализация результатов расчета.

Лабораторная работа № 1. Знакомство с пакетом Firefly. Составление входных файлов, структура выходных файлов, интерпретация результатов расчета.

Лабораторная работа № 2. Задание геометрии и расчет органических молекул с атомами углерода в различных гибридных состояниях.

### **4. Полуэмпирические и неэмпирические методы квантовой химии**

4.1. Слэтеровские и гауссовы орбитали, их свойства и применение. Минимальные и расширенные базисные наборы. Коореляционно-согласованные базисные наборы.

4.2. Полуэмпирические методы квантовой химии. Приближение нулевого дифференциального перекрытия и различные уровни его применения.

4.3. Электронная корреляция, ее составляющие и причины возникновения. Подходы к учету электронной корреляции.

4.4. Пост-хартри-фоковские методы. Метод конфигурационного взаимодействия. Активное пространство. Многоконфигурационные методы.

4.5. Метод связанных кластеров. Кластерный оператор. Методы теории возмущений Меллера-Плессета. Общая характеристика пост-хартри-фоковских методов.

4.6. Теория функционала плотности. Теорема Хоэнберга-Кона. Корреляционно-обменный функционал. Различные варианты методов DFT.

Лабораторная работа № 3. Квантово-химический расчет простейших молекул с применением неэмпирических методов, исследование влияния базиса на погрешность расчета энергии.

Лабораторная работа № 4. Квантово-химический расчет простейших молекул с учетом электронной корреляции.

Лабораторная работа № 5. Квантово-химический расчет электронного строения молекул методами функционала плотности.

### **5. Применение квантовой химии. Теории реакционной способности**

5.1. Поверхность потенциальной энергии и ее особые точки. Понятие об активированном комплексе.

5.2. Постулат Хэммонда. Правило сохранения орбитальной симметрии.

5.3. Статические индексы реакционной способности: молекулярный электростатический потенциал, валентности и порядки связей. Теория граничных орбиталей и ее применение в органической химии.

5.4. Химические концепции в рамках теории функционала плотности. Функции Фукуи.

Лабораторная работа № 6. Квантово-химический расчет молекул органических веществ и определение их свойств (длины, порядки и энергии разрыва связей) с применением полуэмпирических методов.

Лабораторная работа № 7. Квантово-химическое моделирование конформационных переходов с применением полуэмпирических методов.

Лабораторная работа № 8. Квантово-химический анализ реакционной способности молекул органических веществ с применением полуэмпирических методов.

Лабораторная работа № 9. Квантово-химический анализ реакционной способности молекул органических веществ с применением методов функционала плотности.

Лабораторная работа № 10. Квантово-химический расчет частот колебаний в молекулах органических веществ с применением полуэмпирических методов.

Лабораторная работа № 11. Квантово-химическое моделирование элементарного акта и структуры переходных состояний реакций простых молекул.

Лабораторная работа № 12. Квантово-химическое моделирование элементарного акта и структуры переходных состояний реакций радикального отрыва и присоединения.

## **5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

**Вводная лекция** – дает первое целостное представление о дисциплине и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Студенты знакомятся с назначением и задачами курса, его ролью и местом в системе учебных дисциплин и в системе подготовки в целом. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой учебно-методической литературы.

**Академическая лекция** (или лекция общего курса) – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Требования к академической лекции: современный научный уровень и насыщенная информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, обоснований, фактов.

**Лабораторное занятие** – выполнение лабораторной работы обеспечивает закрепление полученных теоретических знаний, обеспечивает освоение навыков самостоятельной работы. Формулировка выводов по полученным результатам учит умению анализировать и обобщать полученные в результате квантово-химических расчетов данные, развивает логическое мышление.

**Консультации** – групповые занятия, являющиеся одной из форм контроля самостоятельной работы студентов.

Для организации самостоятельной работы студентов и проведения текущего контроля успеваемости (в форме промежуточных и итоговых тестов) используются **дистанционные технологии** в виде электронного учебного курса (ЭУК) в системе Moodle ЯрГУ. В ЭУК имеются электронные конспекты лекций, описания лабораторных работ, реализовано представление студентами отчетов по выполненным лабораторным работам. В ЭУК сохраняются оценки, полученные учащимися в процессе изучения курса.

## **6. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения, используемого при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

При осуществлении образовательного процесса используются:

- операционные системы семейства Microsoft Windows;
- программы Microsoft Office;
- программа Adobe Acrobat Reader;

- браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome.
- программа Firefly 8.0 (проведение квантово-химических расчетов, свободная лицензия, <http://classic.chem.msu.ru/gran/firefly/index.html>);
- программа wxMacMolPlt 7.7 (визуализация результатов квантово-химических расчетов, свободная лицензия, <https://brettbode.github.io/wxmacmolplt/>).

## **7. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (при необходимости)**

1. NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase <http://cccbdb.nist.gov/>
2. Автоматизированная библиотечно-информационная система «БУКИ-NEXT» [http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)

## **8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины**

### **а) основная литература**

1. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч.  
Часть 1. Квантовая механика : учебник и практикум для вузов / А.И. Ермаков. – Москва : Издательство Юрайт, 2021. – 183 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-00127-3. – Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. – URL: <https://urait.ru/bcode/471665>  
Часть 2. Квантовая химия : учебник и практикум для вузов / А.И. Ермаков. – Москва : Издательство Юрайт, 2021. – 402 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-00128-0. – Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. – URL: <https://urait.ru/bcode/471666>
2. Тихонов И.В. Основы квантово-химических расчетов [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие. / И.В. Тихонов, А.В. Сирик, А.М. Гробов; Ярослав. гос. ун-т им. П.Г. Демидова – Ярославль: ЯрГУ, 2017. – 55 с.  
<http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20170303.pdf>

### **б) дополнительная литература**

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для вузов. / В.Г. Цирельсон; УМО по образованию в области химической технологии и биотехнологии – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 495 с.: ил. ISBN 978-5-9963-0080-8.  
[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=1274957&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1274957&cat_cd=YARSU)
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие для вузов. / В.И. Барановский – М.: Академия, 2008. – 383 с. ISBN 978-5-7695-3961-9.  
[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=1219858&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1219858&cat_cd=YARSU)

### **в) ресурсы сети «Интернет» (при необходимости)**

1. Сайт кафедры квантовой химии РХТУ им. Д.И. Менделеева <http://quant.distant.ru/>
2. Учебные материалы по физической химии электронной библиотеки химического факультета МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>.

## **9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения лабораторных работ;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;



- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории (ноутбук и/или персональный компьютер, мультимедиа-проектор, настенный проекционный экран).

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, хранящиеся на электронных носителях и обеспечивающие тематические иллюстрации, соответствующие рабочим программам дисциплин.

Для проведения лабораторных работ используется компьютерная техника, позволяющая осуществлять квантово-химические расчеты (персональные компьютеры и/или ноутбуки).

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Число посадочных мест в лекционной аудитории и аудитории для лабораторных работ больше либо равно половине списочного состава группы обучающихся (для проведения лабораторных работ группа обучающихся делится на две подгруппы).

Автор:

Доцент института  
фундаментальной и прикладной химии, к.х.н.



И.В. Тихонов

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины  
«Основы квантовой механики и квантовой химии»**

**Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости  
и промежуточной аттестации студентов по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания и иные материалы,  
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

**Задания для самостоятельной работы  
(проверка осуществляется путем опроса)**

**Задания по теме № 1 «Введение»**

1. Раздел 1.2. Найдите собственные значения и собственные функции операторов  $\frac{d}{dx}$ ,  $\frac{d^2}{dx^2}$

**Задания по теме № 2 «Основы квантовой механики. Строение атомных ядер»**

1. Раздел 2.2. Выведите выражение для оператора проекции момента импульса на ось  $z$  в декартовых и сферических координатах. Определите, коммутируют ли между собой операторы  $\hat{p}_x$  и  $\hat{T}$ ,  $\hat{x}$  и  $\hat{T}$ . Запишите гамильтониан для атомов He, Li, иона  $Be^{2+}$ .
2. Раздел 2.3. Частица находится в основном состоянии в одномерной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками. Найдите вероятность пребывания частицы в области  $l/3 < x < 2l/3$ .
3. Раздел 2.4. Найдите среднее и наиболее вероятное расстояния электрона от ядра в атоме водорода в состояниях  $2s$ ,  $3s$ ,  $3p$ . Найдите энергии электрона в этих состояниях в Дж и Хартри.
4. Раздел 2.6. Найдите значения первых трех частот линий поглощения в сериях Лаймана и Бальмера в спектре атома водорода.

**Задания по теме № 3 «Квантовая химия. Методы решения молекулярной задачи»**

1. Раздел 3.2. Составьте уравнение Шредингера в общем виде и с использованием адиабатического приближения для молекул  $H_2$ , LiH, иона  $He_2^+$ .
2. Раздел 3.3. Запишите детерминант Слэтера для системы  $\varphi_1(\uparrow\downarrow)\varphi_2(\uparrow)\varphi_3(\downarrow)$ .
3. Раздел 3.4. Какой минимальный порядок будут иметь матрицы уравнения Рутана для молекулы  $O_2$ ?  $C_2H_2$ ?  $C_6H_6$ ?

**Задания по теме № 4 «Полуэмпирические и неэмпирические методы квантовой химии»**

1. Раздел 4.1. Какой из базисных наборов (STO-3G, 6-31G, 6-31G(d), 6-31+G(d)) разумнее всего использовать при расчете молекулы  $H_2O$ . Какое число базисных функций при этом будет использовано?
2. Раздел 4.2. Какое число базисных функций будет использовано при расчете молекулы  $C_6H_6$  методом AM1? Какой номер при этом будет иметь ВЗМО?
3. Раздел 4.4. Изобразите диаграммы всех возможных возбужденных состояний в рамках активных пространств (2,3), (4,3).
4. Раздел 4.5. Выпишите вид кластерного оператора для методов CCS, CCSD, CCSDT.
5. Раздел 4.7. Составьте Z-матрицу формата Firefly для молекул  $C_2H_4$ ,  $C_2H_6$ ,  $C_6H_5OH$ .

**Задания по теме № 5 «Применение квантовой химии. Теории реакционной способности»**

1. Раздел 5.1. Найдите размерность ППЭ для молекул  $C_2H_2$ ,  $C_6H_6$ , реакции  $CH_4 + Cl^{\bullet}$ .
2. Раздел 5.2. Изобразите схематично энергетический профиль для реакции Дильса-Альдера, не подчиняющейся постулату Хэммонда.

3. Раздел 5.3. Какую из граничных орбиталей следует рассматривать при определении места а) нуклеофильной, б) электрофильной атаки. Как определить места данных атак с точки зрения зарядового контроля.

### **Контрольная работа № 1**

(проводится в рамках лабораторной работы №3,  
каждый студент получает индивидуальное задание)

Произведите расчет указанной молекулы методом Хартри-Фока в базисах STO-3G, 3-21G, 6-31G, 6-31G(d), 6-311+G(3df,2p). Определите и сравните с экспериментальными значениями длину связи, дипольный момент и потенциал ионизации (по теореме Купманса). Выпишите в таблицу указанные параметры, а также полную энергию молекулы и время, затраченное на расчет. Результаты расчета в каком из базисов лучше передают свойства молекулы при разумных затратах вычислительных ресурсов? Как меняется полная энергия молекулы с увеличением базиса? Можно ли получить точное значение полной энергии молекулы в каком-либо из базисов?

Варианты молекул для расчета: HF, HCl, FCl, H<sub>2</sub>O, F<sub>2</sub>O, HCN, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, LiH.

### **Контрольная работа № 2**

(проводится в рамках лабораторной работы №8,  
каждый студент получает индивидуальное задание)

Произведите расчет указанной молекулы методом РМЗ. Представьте схематично: а) основные геометрические параметры молекулы (длины связей, валентные углы), б) структуру ВЗМО и НВМО молекулы. Определите места электрофильной и нуклеофильной атак в данной молекуле с точки зрения зарядового и орбитального контроля, установите, какой контроль является определяющим в данном случае. Определите наиболее слабую С-Н (О-Н) связь в данной молекуле.

Варианты молекул для расчета: различные замещенные ароматические и гетероциклические соединения, например нитробензол, орто(мета,пара)-метилбензойная кислота, 4-хлорпиридин, 4-нитропирокатехин и т.п.

### **Контрольная работа № 3**

(проводится в рамках лабораторной работы №12,  
каждый студент получает индивидуальное задание)

Произведите расчет структуры переходного состояния указанной реакции методом РМЗ. Осуществите спуск по координате реакции в зону реагентов и продуктов. Определите энергию активации и тепловой эффект процесса.

Варианты реакций для расчета: отрыв атома водорода от простейших органических молекул (метан, этан, этанол, толуол и т.п.) атомами и радикалами (Cl<sup>•</sup>, CH<sub>3</sub>OO<sup>•</sup>, CH<sub>3</sub>O<sup>•</sup>, НОО<sup>•</sup>), присоединение указанных атомов и радикалов к двойной связи (молекулы этилена, метилвинилового эфира, метилакрилата, акрилонитрила, стирола и т.п.).

### **Промежуточные тесты, итоговый тест**

Тестирование проводится в ЭУК в системе Moodle. Банк тестовых вопросов включает 180 заданий, разделенных по 20 категориям.

Четыре промежуточных теста проводятся по разделам № 2 – 5 дисциплины и включают по 10 вопросов из 5 категорий (соответствующих тематике теста), выбранных случайным образом.

Итоговый тест включает 20 вопросов, выбранных по одному из каждой категории случайным образом. Примеры двух возможных вариантов тестов приведены ниже.

### **Вариант 1**

1. Выберите справедливые утверждения для волновой функции системы Ψ:

- A**  $\Psi$  имеет физический смысл вероятности  
**B**  $\Psi^*\Psi$  имеет физический смысл вероятности  
**C** Является функцией одной переменной  
**D** Позволяет получить полную информацию о любой физической величине  
**E** Является функцией состояния квантовой системы

2. Линейными являются операторы:

**A**  $\hat{A}f = -f$       **B**  $\hat{A}f = e^f$       **C**  $\hat{A}f = f^2$       **D**  $\hat{A}f = \frac{\partial f}{\partial x}$       **E**  $\hat{A}f = \sqrt{f}$

3. В атомной системе единиц принимаются за единицу:

- A** абсолютная величина заряда электрона      **B** масса электрона      **C** масса протона  
**D**  $1/12$  массы атома углерода  $^{12}\text{C}$       **E** постоянная Планка

4. Две узловые плоскости имеют сферические гармоники:

- A**  $s$       **B**  $p$       **C**  $d$       **D**  $f$

5. Выберите правильные утверждения. Радиальная функция распределения  $P_{nl}(r)$ :

- A**  $P \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$  при всех  $n$  и  $l$       **B** максимум  $P_{nl}(r)$  удаляется от ядра с ростом  $l$   
**C** меняет знак в узловой точке      **D**  $P \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow 0$  при всех  $n$  и  $l$   
**E** определяет вероятность нахождения электрона на расстоянии от ядра, равном  $r$

6. В приближении Борна-Оппенгеймера выражение

$\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R_{1\alpha}} - \frac{1}{R_{1\beta}} - \frac{1}{R_{2\alpha}} - \frac{1}{R_{2\beta}} + \frac{1}{R_{\alpha\beta}}$  является гамильтонианом для:

- A**  $\text{H}$       **B**  $\text{H}_2$       **C**  $\text{He}$       **D**  $\text{H}_2^+$       **E**  $\text{He}^+$

7. В методе Хартри-Фока используется:

- A** теория возмущений      **B** итерационный способ поиска решения  
**C** вариационный принцип      **D** взаимодействие электрона с усредненным полем  
**E** непосредственный учет межэлектронного взаимодействия

8. Системы, которые нельзя рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока:

- A**  $\text{CH}_3^+$       **B**  $\text{CH}_3^\bullet$       **C**  $\text{NO}_2^-$       **D**  $\text{NO}_2$       **E**  $\text{F}^-$

9. Экранирование электронов в атоме:

- A** дестабилизирует атом  
**B** снимает вырождение энергии орбиталей по квантовому числу  $l$   
**C** снимает вырождение энергии орбиталей по квантовому числу  $n$   
**D** является следствием различной степени перекрывания внешних и внутренних орбиталей  
**E** уменьшает энергию взаимодействия внешних электронов с ядром

10. Для системы  $\varphi_1(\downarrow)\varphi_2(\downarrow)$  детерминант Слэтера имеет вид:

**A**  $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}$       **B**  $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}$       **C**  $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$   
**D**  $\begin{vmatrix} \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}$       **E**  $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}$

11. Диффузные функции включены в следующие базисные наборы:

- A 3-21G\*      B 6-31G      C 6-31+G(2df, p)      D cc-pVTZ      E aug-cc-pVTZ

12. Для расчета системы  $\text{CH}_3\text{COOH}$  лучшим компромиссом с точки зрения «затратность – точность» будет базисный набор:

- A STO-3G      B 6-31G      C 6-31G\*      D 6-31+G      E 6-31+G\*

13. Выберите справедливые утверждения для метода AM1:

- A учитываются ван-дер-ваальсовы взаимодействия  
 B при расчете кулоновских интегралов не учитывается вид орбиталей  
 C учитывается перекрывание орбиталей одного атома  
 D используется частичное пренебрежение дифференциальным перекрыванием  
 E самая сложная параметризация из всех полуэмпирических методов

14. По сравнению с методом RHF расчет молекулы бензола методом CIS в том же базисе:

- A увеличит энергию системы      B приведет к непредсказуемому результату  
 C не изменит энергию системы      D обеспечит учет половины корреляционной энергии  
 E обеспечит учет 90% корреляционной энергии

15. В основе методов функционала плотности лежат:

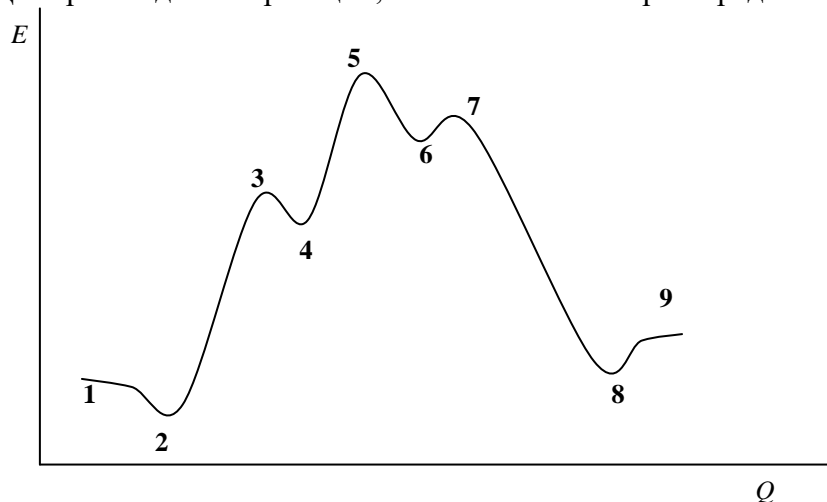
- A метод Ритца      B метод Хартри-Фока      C теорема Хоэнберга-Кона  
 D метод Кона-Шэма      E теория Меллера-Плессе

16. Размерность ППЭ молекулы метана:

17. Гош-конформация бутана с точки зрения ППЭ молекулы является:

- A точкой максимума      B стационарной точкой  
 C точкой локального, но не глобального минимума      D седловой точкой  
 E точкой глобального минимума

Для трехстадийной реакции, сечение ППЭ которой представлено на рисунке, укажите:



18. Переходное состояние третьей стадии (номер точки):

19. Номер наиболее эндотермичной стадии реакции:

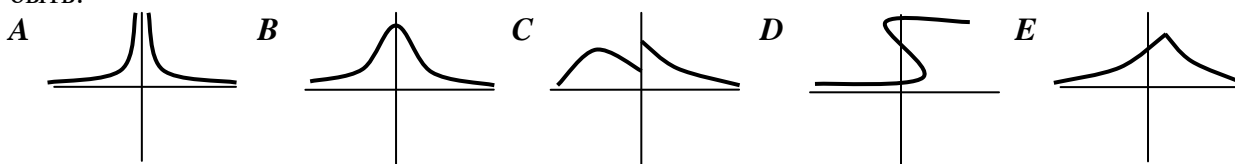
20. Нуклеофильная атака преимущественно протекает:

- A в области максимума молекулярного электростатического потенциала  
 B по наиболее отрицательно заряженному атому в случае зарядово контролируемой реакции

- C** по атому, имеющему наибольшее по модулю значение коэффициента в НВМО в случае орбитально контролируемой реакции
- D** по атому, имеющему наибольшее по модулю значение коэффициента в ВЗМО в случае орбитально контролируемой реакции
- E** в области минимума функции Фукуи  $f_+$

### Вариант 2

1. Из приведенных функций волновыми функциями дискретного спектра энергии могут быть:



2. Операторы в квантовой механике должны быть:

- A** Линейными      **B** Симметричными      **C** Эрмитовыми
- D** Сопряженными      **E** Унитарными

3. Выберите операторы импульса (или проекций импульса):

- A**  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$       **B**  $-\frac{Ze^2}{R}$       **C**  $-i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$       **D**  $-i\hbar \nabla$       **E**  $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$

4. Энергия электронных орбиталей определяются только одним квантовым числом в системах:

- A** He      **B** He<sup>+</sup>      **C** H      **D** Li<sup>+</sup>      **E** Li<sup>2+</sup>

5. Выберите правильные утверждения. Радиальная составляющая волновой функции  $R_{nl}(r)$ :

- A**  $R \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$  при всех  $n$  и  $l$       **B**  $R \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$  при всех  $n$  и  $l$
- C** меняет знак в узловой точке      **D** увеличивает свою протяженность с ростом  $l$
- E** входит в состав волновой функции электрона в атоме как множитель

6. В приближении Борна-Оппенгеймера в гамильтониан электронного уравнения входят операторы:

- A** кинетической энергии электронов      **B** потенциальной энергии отталкивания электронов
- C** кинетической энергии ядер      **D** потенциальной энергии отталкивания ядер
- E** потенциальной энергии притяжения электронов к ядрам

7. Выберите справедливые утверждения для метода Ритца:

- A** волновая функция строится в виде линейной комбинации базисных функций
- B** наименьшее из значений неопределенных множителей Лагранжа  $E_i$  является точным значением энергии основного состояния системы
- C** наименьшее из значений неопределенных множителей Лагранжа  $E_i$  является оценкой сверху для энергии основного состояния системы
- D** значение функционала полной энергии может быть ниже энергии основного состояния квантовой системы
- E** при поиске минимума функционала полной энергии производится варьирование как коэффициентов разложения по базисным функциям, так и самих базисных функций

8. Выберите справедливые утверждения для метода Хартри-Фока-Рутаана:

- A** волновая функция строится в виде детерминанта Слэтера из атомных орбиталей
- B** волновая функция является антисимметричной
- C** межэлектронное отталкивание полностью игнорируется
- D** не учитывается электронная корреляция
- E** используется приближение самосогласованного поля

9. Мультиплетность молекулы бензола в основном состоянии равна:

10. Для системы  $\varphi_1(\uparrow)\varphi_2(\downarrow)$  детерминант Слэтера имеет вид:

$$\begin{array}{lll}
 \mathbf{A} & \begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix} & \mathbf{B} \begin{vmatrix} \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix} & \mathbf{C} \begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix} \\
 \mathbf{D} & \begin{vmatrix} \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix} & \mathbf{E} \begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix} & 
 \end{array}$$

11. Выберите справедливые утверждения для орбиталей Гаусса:

- A** одна примитивная функция удовлетворительно аппроксимирует АО
- B** допускают аналитическое вычисление многоцентровых орбиталей
- C** удовлетворяют cusp-condition
- D** для удовлетворительного описания АО необходимо использовать несколько контрактированных примитивных функций
- E** используются в неэмпирических расчетах

12. Расположите базисные наборы в порядке улучшения качества:

- A** cc-pVTZ      **B** aug-cc-pVQZ
- C** 6-31+G(2df, p)
- D** 3-21G\*
- E** 6-31G\*

13. Выберите справедливые утверждения для метода CNDO/S:

- A** рассматриваются электроны внутренней оболочки
- B** учитываются обменные интегралы
- C** используется приближение Малликена
- D** хорошо передает электронные спектры
- E** используется полное пренебрежение дифференциальным перекрытием

14. Теория возмущений используется в методах:

- A** MP2      **B** CASSCF      **C** CISD(T)      **D** CCSD      **E** MP4(SDQ)

15. Недостатки метода B3LYP:

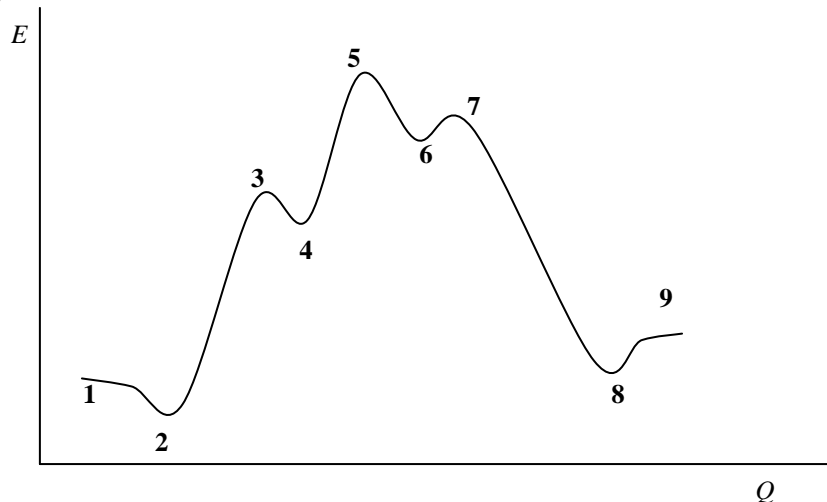
- A** однодетерминантное приближение
- B** плохой учет корреляционной энергии
- C** крайне высокая затратность
- D** неприменимость для расчета возбужденных состояний
- E** большие погрешности в расчете теплот образования молекул

16. Размерность ППЭ реакции  $\text{CH}_4 + \text{Cl}^\bullet$ :

17. Процесс изомеризации в квантово-химическом описании представляет собой:

- A** изменение формы ППЭ
- B** переход системы из одного минимума на ППЭ в другой
- C** переход системы из минимума ППЭ в седловую точку
- D** переход системы на соседнюю ППЭ
- E** процесс, не приводящий к движению изображающей точки системы по ППЭ

18–19. Для трехстадийной реакции, сечение ППЭ которой представлено на рисунке, укажите:



18. Переходное состояние первой стадии (номер точки):

19. Номер стадии реакции, в которой энергия активации минимальна:

20. Выберите справедливые утверждения для разрешенной по симметрии реакции:

A реакция может протекать термически

B реакция может протекать фотохимически

C симметрия занятых орбиталей реагентов соответствует симметрии занятых орбиталей продуктов

D симметрия занятых орбиталей реагентов соответствует симметрии вакантных орбиталей продуктов

E реакция протекает с очень низкой энергией активации

#### Критерии оценивания результатов текущего контроля успеваемости

Форма текущего контроля успеваемости	Правила выставления оценки
Опрос	<p>- <i>Отлично</i> выставляется за полный ответ на поставленный вопрос с включением в содержание ответа рассказа (лекции) преподавателя, материалов учебников, дополнительной литературы без наводящих вопросов; полное выполнение задания.</p> <p>- <i>Хорошо</i> выставляется за полный ответ на поставленный вопрос в объеме рассказа (лекции) преподавателя с включением в содержание ответа материалов учебников с четкими положительными ответами на наводящие вопросы преподавателя; выполнение задания с незначительными ошибками.</p> <p>- <i>Удовлетворительно</i> выставляется за ответ, в котором озвучено более половины требуемого материала, с положительным ответом на большую часть наводящих вопросов; или обучающийся приступил к выполнению задания, наметил алгоритм решения, но допустил серьезные ошибки на этапах решения.</p> <p>- <i>Неудовлетворительно</i> выставляется за ответ, в котором озвучено менее половины требуемого материала или не озвучено главное в содержании вопроса с отрицательными ответами на наводящие вопросы, или обучающийся отказался от ответа без предварительного объяснения уважительных причин; или обучающийся не приступал к выполнению задания или не смог выработать алгоритм его решения.</p>



Контрольная работа	<p>- <i>Отлично</i> выставляется, если обучающийся полностью выполнил поставленное задание, демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме работы, даёт правильный алгоритм решения, смог ответить на все уточняющие и дополнительные вопросы.</p> <p>- <i>Хорошо</i> выставляется, если обучающийся выполнил поставленное задание с небольшими недочетами, демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме работы, допуская незначительные неточности при их применении и выборе алгоритма решения, смог ответить почти полно на все заданные дополнительные и уточняющие вопросы.</p> <p>- <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся в целом выполнил поставленное задание, допуская существенные недочеты, ответил не на все уточняющие и дополнительные вопросы; при выборе алгоритма решения требовались указания преподавателя.</p> <p>- <i>Неудовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся не справился с выполнением задания, не смог выбрать алгоритм его решения, не ответил на вопросы преподавателя, продемонстрировав существенные пробелы в знаниях основного учебного материала.</p>
Лабораторная работа	<p>- <i>Отлично</i> выставляется, если обучающийся имеет глубокие знания учебного материала по теме лабораторной работы, показывает усвоение взаимосвязи основных понятий используемых в работе, смог ответить на все уточняющие и дополнительные вопросы, демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме лабораторной работы, определяет взаимосвязи между показателями задачи, даёт правильный алгоритм решения, определяет междисциплинарные связи по условию задания.</p> <p>- <i>Хорошо</i> выставляется, если обучающийся показал знание учебного материала, усвоил основную литературу, смог ответить почти полно на все заданные дополнительные и уточняющие вопросы. Обучающийся демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме лабораторной работы, допуская незначительные неточности при решении задач, имея неполное понимание междисциплинарных связей при правильном выборе алгоритма решения задания.</p> <p>- <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся в целом освоил материал лабораторной работы, ответил не на все уточняющие и дополнительные вопросы, обучающийся затрудняется с правильной оценкой предложенной задачи, даёт неполный ответ, требующий наводящих вопросов преподавателя, выбор алгоритма решения задачи возможен при наводящих вопросах преподавателя.</p> <p>- <i>Неудовлетворительно</i> выставляется обучающемуся, если он имеет существенные пробелы в знаниях основного учебного материала лабораторной работы, который полностью не раскрыл</p>
Промежуточные тесты, итоговый тест	<p>- <i>Отлично</i> выставляется за 90% правильных ответов.</p> <p>- <i>Хорошо</i> выставляется за 70% правильных ответов.</p> <p>- <i>Удовлетворительно</i> выставляется за 50% правильных ответов.</p> <p>- <i>Неудовлетворительно</i> выставляется при наличии менее 50% правильных ответов или при отказе обучающегося пройти тестовый контроль.</p>

Фонды оценочных средств по дисциплине предусматривают проверку индикаторов достижения компетенций.

## 2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

### Список вопросов к экзамену

1. Место квантовой механики в современной науке. Предпосылки возникновения квантовой механики.
2. Постулаты квантовой механики. Волновая функция и ее свойства. Поведение волновой функции в точках разрыва потенциала.
3. Свойства операторов в квантовой механике. Собственные значения и собственные функции операторов.
4. Операторы физических величин и соотношения между ними. Атомная система единиц.
5. Коммутация операторов и соотношение неопределенностей.
6. Уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера. Эволюция состояний.
7. Уравнение Шредингера для частицы в прямоугольной потенциальной яме.
8. Квантовые эффекты (туннельный эффект, надбарьерное отражение, нулевые колебания) и их проявления в химии.
9. Уравнение Шредингера для атома водорода: отделение центра масс и переход к сферическим координатам.
10. Уравнение Шредингера для атома водорода: решение уравнения для угловой части. Сферические гармоники и их свойства.
11. Уравнение Шредингера для атома водорода: решение уравнения для радиальной части. Радиальная структура атомных орбиталей.
12. Физический смысл квантовых чисел электрона в атоме водорода.
13. Вариационный принцип и линейный вариационный метод.
14. Молекулярное уравнение Шредингера. Упрощения при решении молекулярной задачи. Адиабатическое приближение.
15. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри. Способы представления многоэлектронной волновой функции.
16. Метод Хартри-Фока и его разновидности. Теорема Купманса.
17. Свойства многоэлектронных атомов: энергетические уровни электронов и периодичность изменения свойств.
18. Квантовые числа и термы многоэлектронных атомов.
19. Оптические спектры атома водорода и многоэлектронных атомов.
20. Метод МО ЛКАО. Уравнения Рутаана.
21. Слэтеровские и гауссовы орбитали, их свойства и применение.
22. Минимальные и расширенные базисные наборы.
23. Полуэмпирические методы, основанные на полном пренебрежении дифференциальным перекрытием.
24. Полуэмпирические методы, основанные на частичном пренебрежении дифференциальным перекрытием и пренебрежении дифференциальным двухатомным перекрытием.
25. Электронная корреляция, ее составляющие и причины возникновения.
26. Методы конфигурационного взаимодействия.
27. Понятие активного пространства. Многоконфигурационные методы.
28. Метод связанных кластеров.
29. Методы теории возмущений.
30. Методы теории функционала плотности.

31. Поверхность потенциальной энергии и ее особые точки.
32. Постулат Хэммонда. Правило сохранения орбитальной симметрии.
33. Статические индексы реакционной способности: молекулярный электростатический потенциал, валентности и порядки связей.
34. Теория граничных орбиталей и ее применение в органической химии.
35. Химические концепции в рамках теории функционала плотности. Функции Фукуи.

#### Оценка ответа на экзамене по билетам

Показатели	Критерии
Ответы по вопросам билета	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Содержание ответа соответствует поставленному вопросу</li> <li>– Раскрываются наиболее значимые факты, научные положения,</li> <li>– Соблюдается логическая последовательность в изложении материала</li> </ul>
Ответы на дополнительные вопросы	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Содержание ответа соответствует поставленному вопросу</li> <li>– Раскрываются наиболее значимые факты, научные положения,</li> <li>– Соблюдается логическая последовательность в изложении материала</li> </ul>

Шкала оценивания: 0 баллов – полное отсутствие критерия; 1 балл – частичное выполнение критерия; 2 балла – полное выполнение критерия

Оценка проставляется по количеству набранных баллов:

менее 60% от максимально возможного количества баллов – *неудовлетворительно*,  
 60-75% от максимально возможного количества баллов – *удовлетворительно*,  
 76-85% от максимально возможного количества баллов – *хорошо*,  
 86-100% от максимально возможного количества баллов – *отлично*.

## Приложение №2 к рабочей программе дисциплины «Основы квантовой механики и квантовой химии»

### Методические указания для студентов по освоению дисциплины

Основной формой изложения учебного материала по дисциплине «Основы квантовой механики и квантовой химии» являются лекции с применением презентаций. Это связано с тем, что изучаемый курс содержит большое количество формул и схем. Лекционный курс предоставляется студенту в электронном виде. Вместе с тем необходимо учитывать, что в ходе лекции многие примеры разбираются и иллюстрируются преподавателем на доске. Без конспектирования данных записей невозможно освоить курс в полном объеме.

По большинству тем предусмотрены лабораторные работы, на которых происходит закрепление лекционного материала путем применения его к модельным задачам квантовой механики и конкретным задачам квантовой химии. Примеры решения задач разбираются на лекциях и практических занятиях, при необходимости по наиболее трудным темам проводятся дополнительные консультации. В процессе изучения дисциплины рекомендуется регулярное повторение пройденного лекционного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо дома еще раз прорабатывать и при необходимости дополнять информацией, полученной на консультациях, лабораторных занятиях или из учебной литературы. Большое внимание должно быть уделено выполнению домашней работы. В качестве заданий для самостоятельной работы дома студентам предлагаются задачи, аналогичные разобранным на лекциях или немного более сложные, которые являются результатом объединения нескольких базовых задач. Освоить вопросы, излагаемые в процессе изучения дисциплины самостоятельно студенту крайне сложно, поэтому посещение всех аудиторных занятий является совершенно необходимым.

Полученные на лекциях теоретические знания закрепляются и применяются на практике на лабораторных занятиях, посвященных квантово-химическим расчетам реальных молекул. Следует иметь в виду, что решаемые при этом задачи весьма просты, что объясняется ограниченностью ресурсов применяемой компьютерной техники. Поэтому студенты должны дополнительно осуществлять расчеты самостоятельно, что должно помочь лучше освоить изучаемый курс, а также развить умения и навыки, которые пригодятся при выполнении выпускной квалификационной работы.

Для проверки и контроля усвоения теоретического материала и приобретенных практических навыков проведения квантово-химических расчетов в течение обучения проводятся мероприятия текущей аттестации в виде самостоятельных работ в рамках лабораторных занятий. Также проводятся консультации (при необходимости) по разбору заданий для самостоятельной работы, которые вызвали затруднения. В конце семестра студенты пишут итоговый тест (в качестве допуска к экзамену), а также сдают экзамен. Экзамен принимается по экзаменационным билетам, каждый из которых включает в себя два теоретических вопроса и одну задачу на простейшие квантово-химические расчеты молекул, аналогичные рассматривавшимся на лабораторных занятиях и самостоятельных работах.

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

Для самостоятельной работы рекомендуется использовать литературу, указанную в разделе 8 данной программы.

Также рекомендуется использовать:

**1. Сайт кафедры квантовой химии РХТУ им. Д.И. Менделеева (<http://quant.distant.ru/>)**

Сайт содержит конспект лекций, примеры квантово-химических расчетов с анализом результатов, тестовые задания для самоконтроля, глоссарий терминов, некоторые справочные данные.

**2. Учебные материалы по физической химии электронной библиотеки химического факультета МГУ** (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>). Данный сайт содержит учебные пособия и методические указания, из которых наиболее полезными в рамках данного курса являются:

А.Я.Борщевский. Строение атомных частиц. Водородоподобные атомы (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/borschevskii/1part.pdf>)

А.Я.Борщевский. Строение атомных частиц. Многоэлектронные атомы (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/borschevskii/2part.pdf>)

Новаковская Ю.В. Оценка константы скорости и константы равновесия простой реакции на основании квантовохимических расчетов (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/novakovskaya/NovakovskayaYV.pdf>)

**3. База данных NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase** (<http://cccbdb.nist.gov/>). База данных содержит результаты расчетов большого количества молекул различными методами в разных базисах. Эти данные можно использовать для проверки правильности своих тестовых расчетов, а также для выбора метода расчета и базиса в различных задачах.

**4. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам"** (<http://window.edu.ru/library>).

Целью создания информационной системы "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (ИС "Единое окно ") является обеспечение свободного доступа к интегральному каталогу образовательных интернет-ресурсов и к электронной библиотеке учебно-методических материалов для общего и профессионального образования.

Очень полезными для самостоятельной работы являются следующие издания, представленные в библиотеке этого сайта:

**Кузин Э.Л. Вопросы и задачи по курсу квантовой химии. – Калининград: Изд-во КГУ, 1997. – 37 с.** <http://window.edu.ru/resource/701/22701>

(Даны вопросы, задачи, и образцы их решения по курсу "Квантовая механика и квантовая химия" для студентов химического факультета университета; может быть использована студентами физического факультета.)

**Аминова Р.М. Основы современной квантовой химии: Учебное пособие для студентов и магистрантов физического и химического факультетов Казанского государственного университета. – Казань: Казанский гос. ун-т, 2004. – 106 с.** <http://window.edu.ru/resource/324/78324>

(В пособии дано описание основных квантовомеханических принципов и приближений, которые лежат в основе современных методов квантовой химии. В пособие включен частично материал лекционных курсов, которые читаются студентам химического и физического факультетов Казанского университета. Изложены общие вопросы теории строения атомов и молекул, неэмпирические и полумэмпирические методы и приближения, квантовохимическая терминология. Знание этих положений необходимо для понимания литературного материала, грамотного и осмысленного использования квантовохимических методов в учебных и научных целях, для критического анализа получаемых численных результатов. Пособие написано с целью подготовить студентов и аспирантов к пониманию языка современной квантовой химии, а также к самостоятельным компьютерным вычислениям электронного строения, пространственной структуры и физико-химических свойств различных молекулярных систем.)

**Кондрашин В.Ю. Квантовая механика и квантовая химия. Экспериментальные основы квантовой механики: Учебно-методическое пособие. – Воронеж: Изд-во ВГУ, 2005. – 51 с.** <http://window.edu.ru/resource/952/26952>

(Пособие по квантовой механике подготовлено на кафедрах физической химии и неорганической химии химического факультета Воронежского государственного университета. Рекомендуется для студентов второго курса дневного отделения и четвертого курса вечернего отделения ВГУ.)

**Блатов В.А., Шевченко А.П., Пересыпкина Е.В. Полуэмпирические расчётные методы квантовой химии: Учебное пособие. Изд. 2-е. – Самара: Изд-во "Универс-групп", 2005. – 32 с. <http://window.edu.ru/resource/556/63556>**

(Учебное пособие предназначено для студентов химического факультета СамГУ, изучающих курсы "Квантовая механика и квантовая химия" в рамках учебных планов подготовки химиков-специалистов и химиков-бакалавров. В первой части пособия изложены теоретические основы наиболее распространенных в настоящее время полуэмпирических расчетных методов квантовой химии и даны рекомендации по их практическому применению. Вторая часть включает описание лабораторных работ вычислительного практикума по курсу "Компьютерная химия" и содержит ряд задач, предназначенных для выработки у студентов навыков работы с современными полуэмпирическими расчетными методами.)

**Ишанходжаева М.М., Фролова Ю.В. Физическая химия: практическое руководство к квантово-химическому расчету молекул моделей природных полимеров и их растворителей / под ред. проф. Г.М. Полторацкого; СПбГТУРП. – СПб., 2011. Часть II. – 40 с. <http://window.edu.ru/resource/239/76239>**

(Часть II практического руководства включает материал, позволяющий на практике рассчитать электронные свойства молекул моделей полимеров и их растворителей методами молекулярной механики и полуэмпирическими методами квантовой химии. Цель руководства – выработать у студентов навыки решения практических задач с использованием современных полуэмпирических расчетных методов, представленных в комплексе программ HyperChem. Содержит методические указания для обсуждения полученных результатов расчета молекул органических соединений, а также список литературы для самостоятельной подготовки. Предназначается для студентов химико-технологического и инженерно-экологического факультетов СПбГТУРП всех форм обучения. Подготовлено на кафедре физической и коллоидной химии Санкт-Петербургского государственного технологического университета растительных полимеров.)

Для самостоятельного подбора литературы рекомендуется использовать:

1. [http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php) Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ: более 3000 полных текстов учебных и учебно-методических материалов по основным изучаемым дисциплинам, изданных в университете.
2. <https://urait.ru> Электронно-библиотечная система «Юрайт»: мультидисциплинарный ресурс (учебная, научная и художественная литература, периодика).