

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина»  
Институт естествознания  
Кафедра химии

УТВЕРЖДАЮ  
Директор института:



Е. В. Скрипников:

«21» января 2021 г.

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**

по дисциплине Б1.В.2 Квантовая химия

Направление подготовки/специальность: 04.03.01 - Химия

Профиль/направленность/специализация: Химия твёрдого тела и химия материалов

Уровень высшего образования: бакалавриат

Квалификация: Бакалавр

год набора: 2020

**Автор программы:**

Кандидат химических наук, Балыбин Дмитрий Викторович

Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 - Химия в соответствии с требованиями Министерства образования и науки РФ от «17» июля 2017 г. № 671).

Рабочая программа принята на заседании Кафедры химии «11» января 2021 г. Протокол № 4

Рассмотрена и одобрена на заседании Ученого совета Института естествознания, Протокол от «21» ян

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Цели и задачи дисциплины.....	4
2. Место дисциплины в структуре ОП бакалавра.....	5
3. Объем и содержание дисциплины.....	5
4. Контроль знаний обучающихся и типовые оценочные средства.....	8
5. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля).....	22
6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.....	24
7. Материально-техническое обеспечение дисциплины, программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы.....	24

## 1. Цели и задачи дисциплины

### 1.1 Цель дисциплины – формирование компетенций:

ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов современной вычислительной техники

### 1.2 Типы задач профессиональной деятельности, к которым готовятся обучающиеся в рамках освоения

- организационно-управленческий
- технологический

1.3 Дисциплина ориентирована на подготовку обучающихся к профессиональной деятельности химико-технологическое производство (в сфере оптимизации существующих и разработки новых получения и анализа продукции, в сфере контроля качества сырья, полуфабрикатов и готовой продукции), 40 Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (опытно-конструкторских разработок и внедрения химической продукции различного назначения, в технического контроля качества продукции)

### 1.4 В результате освоения дисциплины у обучающихся должны быть сформированы:

Обобщенные трудовые функции / трудовые функции / трудовые или профессиональные действия (при наличии профстандарта)	Код и наименование компетенции ФГОС ВО, необходимой для формирования трудового или профессионального действия	Индикаторы достижения компетенций
	ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Умеет применять основные закономерности современных методов моделирования в химических расчетах

### 1.5 Согласование междисциплинарных связей дисциплин, обеспечивающих освоение компетенций:

ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с использованием современной вычислительной техники

№ п/п	Наименование дисциплин, определяющих междисциплинарные связи	Форма обучения	
		Очная (семестр)	
		2	8
1	Информатика и информационные технологии	+	
2	Преддипломная практика		+

## 2. Место дисциплины в структуре ОП бакалавриата:

Дисциплина «Квантовая химия» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений по направлению подготовки 04.03.01 - Химия.

Дисциплина «Квантовая химия» изучается в 3 семестре.

## 3. Объем и содержание дисциплины

3.1. Объем дисциплины: 3 з.е.

Очная: 3 з.е.

Вид учебной работы	Очная (всего часов)
<b>Общая трудоёмкость дисциплины</b>	<b>108</b>
Контактная работа	68
Лекции (Лекции)	34
Практические (Практ. раб.)	34
Самостоятельная работа (СР)	40
Зачет	-

### 3.2. Содержание курса:

№ темы	Название раздела/темы	Вид учебной работы, час.			Формы текущего контроля
		Лекции	Практич. раб.	СР	
		О	О	О	
3 семестр					
1	Классическая механика. Динамика и статистические закономерности. Основные понятия теории вероятности	6	6	6	Реферат; работа на семинаре
2	Операторы квантовой механики. Основы квантовой механики	6	6	6	работа на семинаре Реферат
3	Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой механики.	6	6	6	работа на семинаре Реферат
4	Движение частиц в центральном поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле	4	4	6	Реферат; работа на семинаре; коллоквиум
5	Теория возмущений. Теория квантовых переходов между стационарными состояниями	4	4	6	работа на семинаре Реферат

6	Система многих частиц. Система тождественных частиц. Многоэлектронные системы.	4	4	6	Реферат; работа на семинаре
7	Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения ЛКАО. Корреляция электронов	4	4	4	работа на семинаре Реферат; коллоквиум

### **Тема 1. Классическая механика. Динамика и статистические закономерности. Основные понятия теории вероятности (ОПК-3)**

#### **Лекция.**

1. Механика Ньютона. Законы Ньютона. Основные характеристики классической механики: энергия. Потенциальная функция и кинетическая энергия. Системы координат. Механика Лагранжа и Гамильтона.
2. Область существования динамики и статистических закономерностей. Статистическая закономерность.

#### **Практическое занятие.**

1. Статистическое определение вероятности. Теорема сложения и умножения вероятностей. Функция нормировки.
2. Предпосылки возникновения квантовой механики и химии.

#### **Задания для самостоятельной работы.**

1. Одномерная модель свободной частицы. Трёхмерное описание свободной частицы.
2. Движение точки в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

### **Тема 2. Операторы квантовой механики. Основы квантовой механики. (ОПК-3)**

#### **Лекция.**

1. Динамические переменные и задание состояния. Операторы динамических переменных. Оператор момента импульса  $M$ . Оператор квадрата момента импульса  $M^2$ . Оператор Гамильтона (гамильтониан) частиц.
2. Оператор спина. Основные законы квантовой механики. Статистический смысл волновой функции. Вычисление вероятностей результатов измерения.
3. Условия возможности одновременного измерения разных физических величин. Соотношение не соответствующий ей импульс  $p_x$ .

#### **Практическое занятие.**

1. Вычисление коммутаторов операторов.
2. Определение линейности и эрмитовости.

#### **Задания для самостоятельной работы.**

1. Представление операторов в матричной форме. Свойства матриц.
2. Матричная форма уравнения.

### **Тема 3. Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой механики. (ОПК-3)**

#### **Лекция.**

1. Проекция импульса. Импульс. Проекция момента импульса. Квадрат момента импульса. Кинетическая энергия.
2. Спин электрона (оператор). Спин электрона (собственные функции).
3. Полный момент импульса.

#### **Практическое занятие.**

1. Вычисление коммутаторов операторов спина.
2. Определение линейности и эрмитовости импульса и спина

### **Задания для самостоятельной работы.**

1. Представление операторов спина в матричной форме. Свойства матриц.
2. Вычисление коммутаторов моментов импульса.

## **Тема 4. Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле (ОПК-3)**

### **Лекция.**

1. Вводные замечания. Одномерная модель свободной частицы. Трёхмерное описание свободной частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Одномерный потенциальный барьер. Линейный потенциал. Движение электрона в кулоновском поле ядра. Движение электрона в одновалентных атомах. Электронный ток в водорододе.
2. Уравнение Шрёдингера для частицы в центральном поле. Движение электрона в кулоновском поле ядра. Движение электрона в одновалентных атомах. Электронный ток в водорододе.
3. Движение атомов в двухатомной молекуле.

### **Практическое занятие.**

1. Решение уравнения Шрёдингера для одномерной модели.
2. Решение уравнения Шрёдингера для трёхмерной модели.

### **Задания для самостоятельной работы.**

1. Решение уравнения Шрёдингера для атома водорода.
2. Определение термов

## **Тема 5. Теория возмущений. Теория квантовых переходов между стационарными состояниями (ОПК-3)**

### **Лекция.**

1. Сущность метода теории возмущений. Возмущение в отсутствие вырождения невозмущённой задачи.
2. Возмущение при наличии вырождения невозмущённого состояния. Расщепление энергетических уровней в электрическом поле.
3. Квантовые переходы под влияние световой волны.

### **Практическое занятие.**

1. Периодическая система элементов.
2. Линейный вариационный метод. Корреляционные эффекты.

### **Задания для самостоятельной работы.**

1. Нестационарная теория возмущений. Явление квантового перехода.
2. Правила отбора для электронов в атоме. Интеркомбинационный запрет.

## **Тема 6. Система многих частиц. Система тождественных частиц. Многоэлектронные системы. (ОПК-3)**

### **Лекция.**

1. Моменты системы частиц. Разделение движения ядер и электронов в молекулах. Вариационный метод.
2. Антисимметризация волновой функции. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении Хартри-Фока.
3. Квантовые числа многоэлектронных атомов. Периодическая система элементов. Линейный вариационный метод.

### **Практическое занятие.**

1. Уравнение Хартри. Последовательные приближения. Волновая функция системы тождественных частиц.
2. Средняя энергия в одноэлектронном приближении.

### **Задания для самостоятельной работы.**

1. Корреляционные эффекты. Метод конфигурационного взаимодействия.
2. Конфигурационное взаимодействие при заданных конфигурациях.

## **Тема 7. Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО. Корреляция электронов (ОПК-3)**

### **Лекция.**

Корреляция электронов.

**Практическое занятие.**

1. Расщепление спектральных линий в слабом магнитном поле.
2. Линейный вариационный метод. Выбор базиса. Функции.

**Задания для самостоятельной работы.**

1. Парамагнетизм и диамагнетизм атомов.
2. Уравнение Паули. Расщепление спектральных линий в магнитном поле.

**4. Контроль знаний обучающихся и типовые оценочные средства**

**4.1. Распределение баллов:**

3 семестр

- текущий контроль – 90 баллов
- контрольные срезы – 2 среза по 5 баллов каждый
- премиальные баллы – 10 баллов

**Распределение баллов по заданиям:**

№ те мы	Название темы / вид учебной работы	Формы текущег о контрол я / срезы	Мах. кол-во баллов	Методика проведения занятия и оценки



1.	Классическая механика. Динамика и статистические закономерности. Основные понятия теории вероятности	Реферат	5	<p>1. Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы;</li> <li>- наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.</li> </ul> <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. – 1 балл - соответствие плана теме реферата;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- соответствие содержания теме и плану реферата;</li> <li>- полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы;</li> <li>- обоснованность способов и методов работы с материалом;</li> <li>- умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал;</li> <li>- умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы.</li> </ul> <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. – 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.).</li> </ul> <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- грамотность и культура изложения;</li> <li>- владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы;</li> <li>- соблюдение требований к объему реферата;</li> <li>- культура оформления: выделение абзацев.</li> </ul> <p>5. Грамотность Макс. – 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых;</li> <li>- литературный стиль.</li> </ul>
		работа на семинаре	5	<p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.,</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p>

2.	Операторы квантовой механики. Основы квантовой механики.	работа на семинаре	5	<p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.,</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p>
		Реферат	5	<p>1.Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы; - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.</p> <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. – 1 балл - соответствие плана теме реферата; - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы.</p> <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. – 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме; - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.).</p> <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу; - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев.</p> <p>5. Грамотность Макс. – 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей; - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль.</p>

3.	Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой механики.	работа на семинаре	5	<p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.,</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p>
		Реферат	5	<p>1.Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы; - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.</p> <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. – 1 балл - соответствие плана теме реферата; - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы.</p> <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. – 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме; - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.).</p> <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу; - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев.</p> <p>5. Грамотность Макс. – 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей; - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль.</p>

4.	Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле	Реферат	5	<p>1. Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы; - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.</p> <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. - 1 балл - соответствие плана теме реферата; - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы.</p> <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. - 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме; - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.).</p> <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу; - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев.</p> <p>5. Грамотность Макс. - 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей; - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль.</p>
		работа на семинаре (контрольный срез)	5	<p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.,</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p>

		коллоквиум	15	<p>Коллоквиум сдается в устной форме по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 15 баллов:</p> <p>10-15 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала, умение свободно выполнять задания, предусмотренные программой, освоивший основную, и знакомый с дополнительной литературой. На вопросы отвечает кратко, аргументировано, уверенно, по существу.</p> <p>6-9 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала, умение использовать ранее полученные знания с вновь приобретенными, применять их на практике. Вопросы, задаваемые преподавателем, не вызывают существенных затруднений</p> <p>3-5 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками, чувствует себя неуверенно при ответе на вопросы. В ответе не всегда присутствует логика, аргументы привлекаются недостаточно веские. На поставленные вопросы затрудняется с ответами, показывает недостаточно глубокие знания</p> <p>0-2 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Не может привести примеры из реальной практики. Неуверенно и логически непоследовательно излагает материал. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p>
5.	Теория возмущений. Теория квантовых переходов между стационарными состояниями	работа на семинаре	5	<p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.,</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p>

		Реферат	5	<p>1. Новизна реферированного текста  Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы;  - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы;  - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.</p> <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы  Макс. – 1 балл - соответствие плана теме реферата;  - соответствие содержания теме и плану реферата;  - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы;  - обоснованность способов и методов работы с материалом;  - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал;  - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы.</p> <p>3. Обоснованность выбора источников  Макс. – 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме;  - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.).</p> <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу;  - грамотность и культура изложения;  - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы;  - соблюдение требований к объему реферата;  - культура оформления: выделение абзацев.</p> <p>5. Грамотность  Макс. – 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей;  - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых;  - литературный стиль.</p>
--	--	---------	---	---

6.	Система многих частиц. Система тождественных частиц. Многоэлектронные системы.	Реферат	5	<p>1. Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы; - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.</p> <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. - 1 балл - соответствие плана теме реферата; - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы.</p> <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. - 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме; - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.).</p> <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу; - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев.</p> <p>5. Грамотность Макс. - 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей; - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль.</p>
		работа на семинаре	5	<p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.,</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p>

7.	Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО. Корреляция электронов	работа на семинаре	5	<p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.,</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p>
		Реферат(контрольный срез)	5	<p>1.Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы; - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.</p> <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. – 1 балл - соответствие плана теме реферата; - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы.</p> <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. – 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме; - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.).</p> <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу; - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев.</p> <p>5. Грамотность Макс. – 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей; - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль.</p>



		коллоквиум	15	<p>Коллоквиум сдается в устной форме по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 15 баллов:</p> <p>10-15 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала, умение свободно выполнять задания, предусмотренные программой, освоивший основную, и знакомый с дополнительной литературой. На вопросы отвечает кратко, аргументировано, уверенно, по существу.</p> <p>6-9 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала, умение использовать ранее полученные знания с вновь приобретенными, применять их на практике. Вопросы, задаваемые преподавателем, не вызывают существенных затруднений</p> <p>3-5 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционно-го материала, не в полном объеме владеет практическими навыками, чувствует себя неуверенно при ответе на вопросы. В ответе не всегда присутствует логика, аргументы привлекаются недостаточно веские. На поставленные вопросы затрудняется с ответами, показывает недостаточно глубокие знания</p> <p>0-2 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Не может привести примеры из реальной практики. Неуверенно и логически непоследовательно излагает материал. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p>
8.	Премияльные баллы		10	Дополнительные премиальные баллы могут быть начислены за выполнение творческих заданий на выбор студента в зависимости от темы.
9.	Индивидуальные задания, с помощью которых можно набрать дополнительные баллы на экзамене		50	студент может предоставить все задания текущего контроля и контрольные срезы
10.	Итого за семестр		100	

Итоговая оценка по зачету выставляется в 100-балльной шкале и в традиционной четырехбалльной рейтинговой оценки по дисциплине в традиционную четырехбалльную осуществляется следующим образом:

100-балльная система	Традиционная система
50 - 100 баллов	Зачтено
0 - 49 баллов	Не зачтено

#### 4.2 Типовые оценочные средства текущего контроля

##### КОЛЛОКВИУМ

Тема 4. Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центре

1. Механика Ньютона. Законы Ньютона. Основные характеристики классической механики: энергии
2. Потенциальная функция и кинетическая энергия. Системы координат. Механика Лагранжа и Гамильтона

3. Область существования динамики и статистических закономерностей. Статистическая закономерность.
4. Статистическое определение вероятности. Теорема сложения и умножения вероятностей. Функция нормировки.
5. Предпосылки возникновения квантовой механики и химии.
6. Понятие оператора. Свойства операторов.
7. Собственные замечания и собственные функции оператора. Свойства собственных значений и собственных функций.
8. Представление операторов в матричной форме. Свойства матриц.
9. Матричная форма уравнения.
10. Динамические переменные и задание состояния. Операторы динамических переменных. Операторы движения.
11. Оператор момента импульса  $M$ . Оператор квадрата момента импульса  $M^2$ .
12. Оператор Гамильтона (гамильтониан)  $H$  точки. Гамильтониан системы частиц.
13. Оператор спина.
14. Основные законы квантовой механики. Статистический смысл волновой функции.
15. Свойства волновой функции.
16. Вычисление вероятностей результатов измерения.
17. Условия возможности одновременного измерения разных физических величин. Соотношение неопределенностей ей импульс  $p_x$ .
18. Проекция импульса. Импульс.
19. Проекция момента импульса. Квадрат момента импульса.
20. Кинетическая энергия.
21. Спин электрона (оператор). Спин электрона (собственные функции). Полный момент импульса.
22. Изменение состояния во времени. Уравнение Шрёдингера в матричной форме.
23. Вектор тока вероятностей для частицы. Волновая функция для постоянных во времени полей.

#### Тема 7. Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО. [1]

1. Стационарные состояния. Уравнение Шрёдингера для стационарных состояний в матричной форме.
2. Одномерная модель свободной частицы. Трёхмерное описание свободной частицы.
3. Движение точки в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
4. Одномерный потенциальный барьер. Линейный гармонический осциллятор.
5. Уравнение Шрёдингера для частицы в центральном поле. Движение электрона в кулоновском поле.
6. Формы электронных облаков в кулоновском поле ядра.
7. Движение электрона в одновалентных атомах. Электронный ток в водородоподобных атомах и ионах.
8. Движение атомов в двухатомной молекуле.
9. Сущность метода теории возмущений.
10. Возмущение в отсутствие вырождения невозмущенной задачи.
11. Возмущение при наличии вырождения невозмущенного состояния.
12. Расщепление энергетических уровней атома водорода в электрическом поле.
13. Нестационарная теория возмущений.
14. Явление квантового перехода. Квантовые переходы под влиянием световой волны.
15. Правила отбора для электронов в атоме. Интеркомбинационный запрет.
16. Моменты системы частиц. Разделение движения ядер и электронов в молекулах.
17. Вариационный принцип.
18. Самосогласованное поле. Уравнение Хартри.
19. Самосогласованное поле. Последовательные приближения.
20. Волновая функция системы тождественных частиц. Антисимметризация волновой функции.
21. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении.
22. Средняя энергия в одноэлектронном приближении.
23. Уравнение Хартри-Фока. Квантовые числа многоэлектронных атомов.
24. Периодическая система элементов.

25. Линейный вариационный метод. Корреляционные эффекты.
26. Метод конфигурационного взаимодействия. Конфигурационное взаимодействие при заданных координатах.
27. Уравнение Паули. Расщепление спектральных линий в магнитном поле.
28. Расщепление спектральных линий в слабом магнитном поле. Парамагнетизм и диамагнетизм атомов.
29. Линейный вариационный метод. Выбор базиса. Функции.
30. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО. Корреляция электронов.

### **работа на семинаре**

Тема 1. Классическая механика. Динамика и статистические закономерности. Основные понятия и вопросы и задания для семинарских занятий:

1. Механика Ньютона. Законы Ньютона. Основные характеристики классической механики: энергия, импульс.
2. Потенциальная функция и кинетическая энергия. Системы координат. Механика Лагранжа и Гамильтона.
3. Область существования динамики и статистических закономерностей. Статистическая закономерность.
4. Статистическое определение вероятности. Теорема сложения и умножения вероятностей. Функции нормировки.
5. Предпосылки возникновения квантовой механики и химии.

Тема 2. Операторы квантовой механики. Основы квантовой механики.

**вопросы и задания для семинарских занятий:**

1. Предпосылки возникновения квантовой механики и химии.
2. Понятие оператора. Свойства операторов.
3. Собственные значения и собственные функции оператора. Свойства собственных значений и собственных функций.
4. Представление операторов в матричной форме. Свойства матриц.
5. Матричная форма уравнения.

Тема 3. Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой механики.

**вопросы и задания для семинарских занятий:**

1. Вычисление коммутаторов операторов спина.
2. Определение линейности и эрмитовости импульса и спина.
3. Проекция импульса. Импульс. Проекция момента импульса. Квадрат момента импульса. Кинетическая энергия.
4. Спин электрона (оператор). Спин электрона (собственные функции).
5. Полный момент импульса.

Тема 4. Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле.

**вопросы и задания для семинарских занятий:**

1. Одномерная модель свободной частицы.
2. Трехмерное описание свободной частицы.
3. Движение точки в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
4. Одномерный потенциальный барьер.
5. Линейный гармонический осциллятор.

Тема 5. Теория возмущений. Теория квантовых переходов между стационарными состояниями.

**вопросы и задания для семинарских занятий:**

1. Сущность метода теории возмущений. Возмущение в отсутствие вырождения невозмущенной задачи.
2. Возмущение при наличии вырождения невозмущенного состояния. Расщепление энергетических уровней в электрическом поле.
3. Квантовые переходы под влияние световой волны.
4. Периодическая система элементов.

## 5. Линейный вариационный метод. Корреляционные эффекты.

Тема 6. Система многих частиц. Система тождественных частиц. Многоэлектронные вопросы и задания для семинарских занятий:

1. Моменты системы частиц. Разделение движения ядер и электронов в молекулах.
2. Вариационный принцип. Самосоглазованное поле.
3. Антисимметризация волновой функции. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном поле.
4. Уравнение Хартри-Фока.
5. Квантовые числа многоэлектронных атомов.

Тема 7. Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО. Вопросы и задания для семинарских занятий:

1. Уравнение Паули. Расщепление спектральных линий в магнитном поле.
2. Парамагнетизм и диамагнетизм атомов.
3. Линейный вариационный метод. Выбор базиса. Функции.
4. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО.
5. Корреляция электронов

## Реферат

Тема 1. Классическая механика. Динамика и статистические закономерности. Основные понятия. Темы рефератов:

1. Исходные положения квантовой механики
2. Центральное поле и момент количества движения
3. Приближенные методы решения задач квантовой механики
4. Одномерная модель свободной частицы. Трехмерное описание свободной частицы.
5. Движение точки в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Тема 2. Операторы квантовой механики. Основы квантовой механики.

Темы рефератов:

1. Теория симметрии в квантовой механике
2. Общие вопросы решения молекулярных задач
3. Одноэлектронное приближение
4. Вычисление коммутаторов операторов.
5. Определение линейности и эрмитовости.

Тема 3. Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой механики. Темы рефератов:

1. Упрощения при решении электронной задачи.
2. Тонкие взаимодействия и кристаллическое поле.
3. Корреляционные диаграммы и учет симметрии.
4. Представление операторов спина в матричной форме. Свойства матриц.
5. Вычисление коммутаторов моментов импульса.

Тема 4. Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле. Темы рефератов:

1. Решение уравнения Шрёдингера для атома водорода.
2. Определение термов.
3. Движение электрона в кулоновском поле ядра.

## 5. Формы электронных облаков в кулоновском поле ядра.

Тема 5. Теория возмущений. Теория квантовых переходов между стационарными состояниями.

### Темы рефератов:

1. Движение ядер.
2. Химическая связь.
3. Нестационарная теория возмущений. Явление квантового перехода.
4. Правила отбора для электронов в атоме.
5. Интеркомбинационный запрет.

Тема 6. Система многих частиц. Система тождественных частиц. Многоэлектронные атомы.

### Темы рефератов:

1. Уравнение Хартри. Последовательные приближения. Волновая функция системы тождественных частиц.
2. Средняя энергия в одноэлектронном приближении.
3. Корреляционные эффекты.
4. Метод конфигурационного взаимодействия.
5. Конфигурационное взаимодействие при заданных конфигурациях.

Тема 7. Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО.

### Темы рефератов:

1. Расщепление спектральных линий в магнитном поле.
2. Выбор базиса. Функции.
3. Периодическая система элементов. Линейный вариационный метод.
4. Движение электрона в одновалентных атомах.
5. Электронный ток в водородоподобных атомах и ионах.

## 4.3 Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета

### Типовые вопросы зачета (ОПК-3)

1. Механика Ньютона. Законы Ньютона. Основные характеристики классической механики: энтропия, импульс, энергия.
2. Потенциальная функция и кинетическая энергия. Системы координат. Механика Лагранжа и Гамильтона.
3. Область существования динамики и статистических закономерностей. Статистическая законность.
4. Статистическое определение вероятности. Теорема сложения и умножения вероятностей. Коэффициент нормировки.
5. Предпосылки возникновения квантовой механики и химии.
6. Понятие оператора. Свойства операторов.
7. Собственные значения и собственные функции оператора. Свойства собственных значений операторов.
8. Представление операторов в матричной форме. Свойства матриц.
9. Матричная форма уравнения.
10. Динамические переменные и задание состояния. Операторы динамических переменных. Оператор Гамильтона.
11. Оператор момента импульса  $M$ . Оператор квадрата момента импульса  $M^2$ .
12. Оператор Гамильтона (гамильтониан)  $H$  точки. Гамильтониан системы частиц.
13. Оператор спина.

### Типовые задания для зачета (ОПК-3)

#### Темы рефератов.

1. Собственные значения и собственные функции оператора. Свойства собственных значений и собственных функций.
2. Представление операторов в матричной форме. Свойства матриц.

3. Динамические переменные и задание состояния. Операторы динамических переменных. Оператор
4. Оператор момента импульса  $M$ . Оператор квадрата момента импульса  $M$ .
5. Оператор Гамильтона (гамильтониан)  $H$  точки. Гамильтониан системы частиц.
6. Основные законы квантовой механики. Статистический смысл волновой функции.
7. Свойства волновой функции.
8. Вычисление вероятностей результатов измерения.
9. Условия возможности одновременного измерения разных физических величин. Соотношение не соответствующий ей импульс  $p_x$ .
10. Кинетическая энергия.

#### 4.4. Шкала оценивания промежуточной аттестации

Оценка	Компетенции	Дескрипторы (уровни) – основные признаки освоения (показатели достижения результата)
«зачтено» (50 - 100 баллов)	ОПК-3	Умеет применять основные закономерности современных методов химических расчётах
«не зачтено» (0 - 49 баллов)	ОПК-3	Не умеет применять основные закономерности современных методов химических расчётах

### 5. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

#### 5.1 Методические указания по организации самостоятельной работы обучающихся:

Приступая к изучению дисциплины, в первую очередь обучающимся необходимо ознакомиться с дисциплины (РПД), которая определяет содержание, объем, а также порядок изучения и преподавания части.

Для самостоятельной работы важное значение имеют разделы «Объем и содержание дисциплины», «Информационное обеспечение дисциплины» и «Материально-техническое обеспечение дисциплины, профессиональные базы данных и информационные справочные системы».

В разделе «Объем и содержание дисциплины» указываются все разделы и темы изучаемой дисциплины, планируемый объем в академических часах.

В разделе «Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины» указана рекомендуемая литература.

В разделе «Материально-техническое обеспечение дисциплины, программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы» содержится перечень профессиональных баз данных и информационных систем, необходимых для освоения дисциплины.

#### 5.2 Рекомендации обучающимся по работе с теоретическими материалами по дисциплине

При изучении и проработке теоретического материала необходимо:

- просмотреть еще раз презентацию лекции в системе MOODLe, повторить законспектированный материал и дополнить его с учетом рекомендованной дополнительной литературы;
- при самостоятельном изучении теоретической темы сделать конспект, используя рекомендации профессиональных баз данных и информационные справочные системы;
- ответить на вопросы для самостоятельной работы, по теме представленные в пункте 3.2 РПД.
- при подготовке к текущему контролю использовать материалы фонда оценочных средств (ФОС).

#### 5.3 Рекомендации по работе с научной и учебной литературой

Работа с основной и дополнительной литературой является главной формой самостоятельной работы. Устный опрос на семинарских занятиях, к дебатам, тестированию, экзамену. Она включает просмотр рекомендованных источников и литературы по тематике лекций.

Конспект лекции должен содержать реферативную запись основных вопросов лекции, в том числе с использованием MOODLe презентации, основных источников и литературы по темам, выводы по каждому вопросу. Конспект должен быть распечатан в рамках распечатки выдачи презентаций лекций или в отдельной тетради по предмету. Он должен быть содержать не относящуюся к теме информацию или рисунки.

Конспекты научной литературы при самостоятельной подготовке к занятиям должны содержать ответ на вопрос, иметь ссылку на источник информации с обязательным указанием автора, названия и года издания литературы. Конспект может быть опорным (содержать лишь основные ключевые позиции), но при этом по вопросу, может быть подробным. Объем конспекта определяется самим студентом.

В процессе работы с основной и дополнительной литературой студент может:

- делать записи по ходу чтения в виде простого или развернутого плана (создавать перечень основных источников);
- составлять тезисы (цитирование наиболее важных мест статьи или монографии, короткое изложение);
- готовить аннотации (краткое обобщение основных вопросов работы);
- создавать конспекты (развернутые тезисы).

#### 5.4. Рекомендации по подготовке к отдельным заданиям текущего контроля

Собеседование предполагает организацию беседы преподавателя со студентами по вопросам практического выявления их знаний по определенному разделу, теме, проблеме и т.п. Все члены группы участвуют в обсуждении, добавлять информацию, дискутировать, задавать вопросы и т.д.

Устный опрос может применяться в различных формах: фронтальный, индивидуальный, комбинированный. Ответы подлежат оценке:

- правильность ответа по содержанию;
- полнота и глубина ответа;
- сознательность ответа;
- логика изложения материала;
- рациональность использованных приемов и способов решения поставленной учебной задачи;
- своевременность и эффективность использования наглядных пособий и технических средств при ответе;
- использование дополнительного материала;
- рациональность использования времени, отведенного на задание.

Устный опрос может сопровождаться презентацией, которая подготавливается по одному из вопросов. При выступлении с презентацией необходимо обращать внимание на такие моменты как:

- содержание презентации: актуальность темы, полнота ее раскрытия, смысловое содержание, соответствие методическим требованиям (цели, ссылки на ресурсы, соответствие содержанию, направленность, соответствие содержания заявленной форме, адекватность использования технических средств, последовательность и логичность презентуемого материала);
- оформление презентации: объем (оптимальное количество), дизайн (читаемость, наличие и соответствие звуковому оформлению, структурирование информации, соответствие заявленным требованиям), оригинальность, использование возможности программной среды, соответствие стандартам оформления;
- личностные качества: ораторские способности, соблюдение регламента, эмоциональность, усвоенные и систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам программы;
- содержание выступления: логичность изложения материала, раскрытие темы, доступность изложения, использование средств ИКТ, способы и условия достижения результативности и эффективности для выполнения учебной деятельности, доказательность принимаемых решений, умение аргументировать свои заключения.

## 6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 6.1 Основная литература:

1. Гельман Г. Квантовая химия. - 2-е изд., доп.. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. - 533 с.
2. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. п. Лаборатория знаний, 2010. - 496 с.

### 6.2 Дополнительная литература:

1. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособие. - М.: Академия, 2008. - 312 с.
2. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Строение вещества : учеб. пособие. - 3-е изд., перераб. и доп.. - М.: Академия, 2008. - 312 с.

### 6.3 Иные источники:

1. Интернет-энциклопедии - <http://www.rubicon.com/>

## **7. Материально-техническое обеспечение дисциплины, программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы**

Для проведения занятий по дисциплине необходимо следующее материально-техническое обеспечение проведения занятий лекционного и семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, аттестации, помещения для самостоятельной работы.

Учебные аудитории и помещения для самостоятельной работы укомплектованы специализированными средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы укомплектованы компьютерной техникой с возможностью обеспечения доступа в электронную информационно-образовательную среду Университета.

Для проведения занятий лекционного типа используются наборы демонстрационного оборудования и иллюстрации (проектор, ноутбук, экран/ интерактивная доска).

Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

Microsoft Office Профессиональный плюс 2007

Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный Russian Edition. 1500-2499 Node 1 year Education

Adobe Reader XI (11.0.08) - Russian Adobe Systems Incorporated 10.11.2014 187,00 MB 11.0.08

7-Zip 9.20

Операционная система Microsoft Windows 10

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

1. Научная электронная библиотека Российской академии естествознания. – URL: <https://www.monograf.ru/>

2. Электронный каталог Фундаментальной библиотеки ТГУ. – URL: <http://biblio.tsutmb.ru/elektronnyj-katalog/>

3. Университетская библиотека онлайн: электронно-библиотечная система. – URL: <https://biblioclub.ru/>

### **Электронная информационно-образовательная среда**

[https://auth.tsutmb.ru/authorize?response\\_type=code&client\\_id=moodle&scope=openid](https://auth.tsutmb.ru/authorize?response_type=code&client_id=moodle&scope=openid)

Взаимодействие преподавателя и студента в процессе обучения осуществляется посредством мультимедийных сетевых, телекоммуникационных технологий, используемых в электронной информационно-образовательной среде.