

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ХИМИКО-БИОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
И.о. проректора по учебной работе
Ф.Д. Кодзоева
«30» июня 2022г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.О.11 «Квантовая химия»

Направление подготовки
04.03.01 Химия

Направленность (профиль подготовки)
Химия

Квалификация выпускника
Бакалавр

Форма обучения
Очная

г. Магас, 2022

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями изучения дисциплины «Квантовая химия» являются:

- формирование основ современной теоретической химии, ознакомление с квантово-механическими методами описания химических систем (атомов, молекул, кристаллов) и реакций.

- изучение студентами основ квантовой механики в приложении к решению химических задач, а также теоретических и расчетных методов квантовой химии. Основное внимание уделяется не математическому аппарату, а расшифровке физического смысла понятий квантовой механики и квантовой химии и практическому овладению расчетными методами квантовой химии.

Формируемые дисциплиной знания и умения готовят выпускника данной образовательной программы к выполнению следующих обобщенных трудовых функций (трудовых функций):

Таблица 1.1.

Код и наименование профессионального стандарта	Обобщенные трудовые функции			Трудовые функции		
	Код	Наименование	Уровень квалификации	Наименование	Код	Уровень (подуровень) квалификации
01.001 Педагог (педагогическая деятельность в дошкольном, начальном общем, основном общем, среднем общем образовании) (воспитатель, учитель)	А	Педагогическая деятельность по проектированию и реализации образовательного процесса организациях дошкольного, начального общего, основного общего, среднего общего образования	6	Общепедагогическая функция. Обучение	A/01.6	6
				Воспитательная деятельность	A/02.6	6
				Развивающая деятельность	A/03.6	6
	В	Педагогическая деятельность по проектированию и реализации основных общеобразовательных программ	6	Педагогическая деятельность по реализации программ основного и среднего общего образования	B/03.6	6

40.001 Специалист по патентоведению	В	Аналитическое сопровождение процесса создания РИД и СИ (в отрасли экономики)	6	Проведение комплексных патентно-информационных исследований	В/01.6	6
				Подготовка к проведению исследований на патентную чистоту объекта ИС	В/02.6	6
				Исследование патентной чистоты объекта ИС	В/03.6	6
				Разработка аналитических материалов по динамике и тенденциям этапов жизненного цикла РИД	В/04.6	6
				Организация и обеспечение мер по выявлению РИД и СИ в процессе осуществления деятельности организации	В/05.6	6
40.008 Специалист по организации и управлению научно-исследовательскими и опытно-конструкторскими работами	А	Организация выполнения научно-исследовательских работ по закрепленной тематике	6	Разработка и организация выполнения мероприятий по тематическому плану	А/01.6	6
				Управление разработкой технической документации проектных работ	А/02.6	6
				Осуществление работ по планированию ресурсного обеспечения проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ	А/03.6	6
	В	Организация проведения работ по выполнению научно-исследовательских и опытноконструкторских работ	6	Организация выполнения научно-исследовательских работ по проблемам, предусмотренным тематическим планом сектора (лаборатории)	В/01.6	6
				Управление ресурсами соответствующего структурного подразделения	В/02.6	6

				организации		
				Организация анализа и оптимизации процессов управления жизненным циклом научно-исследовательских и опытноконструкторских работ	В/03.6	6
40.010 Специалист по техническому контролю качества продукции	С	Управление качеством продукции на всех стадиях производственного процесса	6	Выявление причин брака в производстве продукции и разработка рекомендаций по его предупреждению	С/01.6	6
				Организация работ по предотвращению выпуска бракованной продукции	С/02.6	6
				Разработка новых методик технического контроля качества продукции	С/03.6	6
40.011 Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам	В	Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок при исследовании самостоятельных тем	6	Проведение патентных исследований и определение характеристик продукции (услуг)	В/01.6	6
				Проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований	В/02.6	6
				Руководство группой работников при исследовании самостоятельных тем	В/03.6	6
	С	Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ по тематике организации	6	Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам	С/01.6	6
				Управление результатами научно-исследовательских и опытноконструкторских	С/02.6	6

				работ		
40.060 Специалист по сертификации продукции	В	Организация проведения работ по подтверждению соответствия продукции (услуг) организации	6	Организация работ по подтверждению соответствия продукции (работ и услуг) и систем управления качеством	В/01.6	6

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Квантовая химия» относится к обязательной части дисциплин Блока 1; изучается в 4 семестре и представляет собой теоретическую основу для изучения последующих курсов химического профиля – физической химии, коллоидной химии, химической технологии, физико-химических методов исследования.

Таблица 2.1.

Связь дисциплины «Квантовая химия» с предшествующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, предшествующие дисциплине «Квантовая химия»	Семестр
Б1.О.17	Математика	1-4
Б1.В.04	Физика	1-4
Б1.В.02	Информатика	1-4
Б1.О.04	Неорганическая химия	2,3

Таблица 2.2.

Связь дисциплины «Квантовая химия» с последующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, следующие за дисциплиной «Квантовая химия»	Семестр
Б1.О.12	Строение вещества	5
Б1.О.06	Органическая химия	6,7
Б1.О.07	Физическая химия	6,7

Б1.В.13	Физические методы исследования	6
Б1.В.ДВ.06.01.	Теоретические основы неорганической химии	8
Б1.О.14	Химическая технология	5

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

• **Знать:**

- роль квантовой химии как теоретического фундамента современной химии;
- о квантовой химии как разделе физической химии и ее роли в современной химии;
- возможности применения основ квантовой механики к решению химических задач;
- о границах применимости законов и теорий квантовой механики и квантовой химии;
- принципы использования теоретических и расчетных методов квантовой химии для решения различных практических задач.

• **Уметь:**

- продемонстрировать связь фундаментальных экспериментов с теорией квантовой механики с помощью известных математических методов; решать задачи по данной дисциплине.
- самостоятельно формулировать задачу физико-химического исследования в химических системах;
- пользуясь полученными знаниями, уметь выбирать оптимальные пути и методы решения поставленных задач;
- проводить физико-химические исследования систем и процессов с использованием современных методов и приборов ФХМА;
- проводить физико-химические расчеты;
- пользоваться справочной литературой;
- графически отображать полученные зависимости;
- анализировать и обсуждать результаты физико-химических исследований;
- вести научную дискуссию.

• **Владеть:**

- основами расчетных методов квантовой химии.
- пространственным мышлением;
- основными понятиями химии;
- навыками поиска и обработки информации.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

Код компетенции	Наименование компетенции	Индикатор достижения компетенции	В результате освоения дисциплины обучающийся должен:
-----------------	--------------------------	----------------------------------	--

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения			
УК-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие;	Знать: - понятие и классификация систем; - структуру и закономерности функционирования систем; - особенности системного подхода в научном познании; - понятие о системе, её целях, задачах и общих принципах; - основные технологии поиска и сбора информации; - форматы представления информации в компьютере; - правила использования средств связи; - информационно-поисковые системы и базы данных; - технологию осуществления поиска информации; - технологию систематизации полученной информации; - способы статистической обработки данных, представленных в различных измерительных шкалах и анализ полученных результатов; - виды и формы работы с педагогической и научной литературой; - требования к оформлению библиографии (списка литературы). Уметь: - работать с информацией, представленной в различной форме; - обрабатывать данные средствами стандартного программного обеспечения; - синтезировать информацию, представленную в различных источниках; - - выбирать источники информации, адекватные поставленным задачам и соответствующие научному мировоззрению; - осуществлять поиск информации; - интерпретировать и ранжировать информацию, требуемую для решения поставленной задачи. Владеть: - персональным компьютером и поисковыми сервисами;
		УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи;	
		УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов;	
		УК-1.4. При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения;	
		УК-1.5 Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки.	

			- методиками аналитико-синтетической обработки информации из различных информационно-поисковых систем (предметизация, аннотирование, реферирование).
Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения			
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1. Знает основные методы, способы и средства получения, хранения, обработки результатов научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	Знать: современные представления о строении и структуре вещества, теоретические основы расчета и методы экспериментального определения физико-химических характеристик исследуемых соединений в зависимости от их строения и структуры. Уметь: применять теоретические и полу-эмпирические модели и (или) методы при решении задач профессиональной деятельности; - использовать современное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении конкретных физико-химических задач. Владеть: - навыками использования стандартного программного обеспечения для решения профессиональных задач (в том числе, для обработки экспериментальных результатов, математического моделирования процессов и объектов на базе стандартных пакетов, прикладных программных комплексов и т.д.).
		ОПК-3.2 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности;	
		ОПК-3.3. Умеет получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий;	
		ОПК-3.4. Владеет методами регистрации и программным обеспечением для обработки результатов научного эксперимента.	
Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения			
ПК-1	Способен проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты.	ПК-1.1. Демонстрирует знания основных методов обработки химической информации и требований к отчетам и проектам; назначения наиболее распространенных средств автоматизации информационной деятельности; назначения и функции операционных систем;	Знать: - основные методов обработки химической информации и требований к отчетам и проектам; - назначения наиболее распространенных средств автоматизации информационной деятельности; - назначения и функции операционных систем. Уметь: - использовать современные методы для решения химических задач; - работать с базами данных в компьютерных сетях; - использовать полученные знания для обработки химической информации и составления отчетов и проектов;
		ПК-1.2. Использует современные методы для решения химических задач, работает с базами данных в ком-	

		<p>пьютерных сетях; использует полученные знания для обработки химической информации и составления отчетов и проектов; использует базовые знания в области естественных наук при решении задач химического профиля;</p> <p>ПК- 1.3. Владеет навыками использования приобретенных знаний и умений в практической деятельности и повседневной жизни; навыками эффективной организации индивидуального информационного пространства: эффективного применения информационных образовательных ресурсов в учебной деятельности, создания баз данных, применения методов математического моделирования для решения профессиональных задач; методами статистической обработки результатов экспериментальных исследований.</p>	<p>- использовать базовые знания в области естественных наук при решении задач химического профиля.</p> <p>Владеть: навыками использования приобретенных знаний и умений в практической деятельности и повседневной жизни;</p> <p>- навыками эффективной организации индивидуального информационного пространства: эффективного применения информационных образовательных ресурсов в учебной деятельности, создания баз данных, применения методов математического моделирования для решения профессиональных задач;</p> <p>- методами статистической обработки результатов экспериментальных исследований.</p>
--	--	--	--

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Таблица 4.1.

Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	4 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	144	144
Аудиторные занятия	84	84
Лекции	34	34
Практические занятия	50	50
Самостоятельная работа студентов (СРС)	33	33

Контроль	27	27
----------	----	----

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ

Таблица 5.1.

5.1. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единиц, 144 часа.

п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы			
				Лекции	Практ. занят.	Самостоятельная работа	Формы контроля
1.	Становление квантовой механики и ее основные положения.	4	1,2	2	6	7	Тестир.
2	Квантово-механическое описание одноэлектронных атомов.	4	3-5	8	10	10	Опрос
3	Квантово-механическое описание многоэлектронных атомов.	4	6-10	8	10	10	Коллокви.
4	Квантовая теория образования химической связи и химических реакций.	4	11-14	8	12	10	Опрос
5	Квантово-механическое описание различных молекулярных и кристаллических систем.	4	15-17	8	12	10	Опрос
	Итого:			34	50	33	

5.2. Содержание дисциплины «Квантовая химия»

Предмет квантовой механики. Основные этапы развития квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики. Операторы, их свойства. Эрмитовы операторы, их собственные значения и собственные функции. Вырождение.

Постулаты квантовой механики. Волновые функции, их свойства. Нормировка волновых функций. Вероятность результатов измерения физических величин, средние значения

наблюдаемых. Плотность вероятности нахождения частиц в элементе объема пространства.

Принцип соответствия и операторы квантовой механики. Оператор Гамильтона. Соотношение неопределенностей Гейзенберга. Системы тождественных частиц. Фермионы и бозоны. Антисимметрия волновой функции для системы электронов. Принцип дополнительности Бора. Теорема Эренфеста.

Уравнение Шредингера. Точно решаемые задачи квантовой механики. Модельные задачи о прямоугольном ящике и гармоническом осцилляторе. Жесткий ротатор. Понятие о туннельном эффекте. Модель свободного электрона. Теорема Гильберта.

Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Атомные орбитали, их радиальные и угловые компоненты. Квантовые числа, их физический смысл. Теория момента импульса. Спин: операторы, собственные значения, собственные функции. Правила сложения моментов импульса. Спин-орбитальное взаимодействие.

Приближенные методы решения квантовомеханических задач. Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие вырождения энергетических уровней. Вариационная теорема и линейный и нелинейный вариационные методы.

Многоэлектронный атом. Квантовые числа многоэлектронного атома. Термы многоэлектронного атома. Правила Хунда. L,S-связь. Правила и орбитали Слэтера-Зенера.

Переходы под влиянием электромагнитного излучения. Правила отбора, коэффициенты Эйнштейна. Влияние внешнего поля. Эффекты Штарка, Зеемана и Пашена-Бака.

Квантовая химия. Молекулярное уравнение Шредингера. Адиабатическое приближение. Приближение Борна-Оппенгеймера. Вращение системы ядер как целого и колебания ядер. Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменения при образовании химических соединений. Подход Бейдера.

Методы Хартри и Хартри-Фока. Самосогласованное поле (ССП). Уравнения метода ХФ. Представление МО в виде ЛКАО. Уравнения Хартри-Фока-Рутаана. Базисные функции Слэтера и Гаусса.

Классификация состояний и МО по симметрии. Расчеты двухатомных молекул. Корреляционные диаграммы двухатомных молекул. МО двухатомных гомо- и гетероядерных молекул. (He_2 , Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , CO , HF , LiF).

МО малых многоатомных молекул (BeH_2 , BH_3 , BF_3 , NH_3 , H_2O , CH_4 , C_2H_4 , NO_2).

Элементы и операции симметрии. Точечные группы. Таблицы характеров. Разложение приводимых представлений. Оператор проектирования.

Качественный подход к анализу геометрических конфигураций различных состояний молекул. Корреляционные диаграммы Уолша. Простой метод Хюккеля (МОХ) для π -электронных систем. σ - и π -МО. π -Электронное приближение. Расчеты простейших углеводородных и

гетероатомных сопряженных систем методом МОХ.

Орбитали симметрии и эквивалентные орбитали. Гибридизация в базисе функций s-, p- и d-типов. Локализованные МО и классическая теория химического строения.

Квантовохимическое описание химических реакций. Переходное состояние на поверхности потенциальной энергии (ППЭ). индексы реакционной способности (ИРС). Теория граничных орбиталей Фукуи. Типы химических реакций. Согласованные (концертные) и ступенчатые процессы. Термические и фотохимические реакции.

Сохранение орбитальной симметрии (принцип Вудворда-Хоффмана). Примеры применения принципа и границы его применимости.

Основные направления развития квантовой химии. Методы компьютерной квантовой химии. Полуэмпирические и неэмпирические расчеты. Современные основные программные квантовохимические комплексы MOPAC, Gaussian, HyperChem.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе обучения используются традиционные образовательные технологии (лекции, семинары, практические работы) и активные инновационные образовательные технологии:

1. Семинар в диалоговом режиме применяется в основном при обсуждении выступлений студентов с докладами (рефератами)
2. Групповой разбор результатов контрольных работ
3. Встречи с сотрудниками и руководителями профильных лабораторий и предприятий - потенциальными работодателями выпускников.

В целом при изучении курса активные и интерактивные формы проведения занятий составляют не менее 30% аудиторных занятий.

7. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Лекционные занятия проводятся 1 раз неделю в объеме 2 часов лекций и 3 часов практических занятий в 4 семестре. После окончания изучения каждой темы студенты проходят тестирование, собеседование, выполняют контрольные работы.

7.1. Перечень-учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

1. Блохинцев А.И. Основы квантовой механики. –М.: Наука, 1976.

2. Мелешина А. М. Курс квантовой механики для химиков.-М.: Высшая школа, 1980
3. Минкин В.И. , Миняев Р.М., Симкин Б. Я.. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. –М.: Химия, 1986.
4. Фларри Р. Квантовая химия. –М.: Мир, 1985.
5. Симкин Б.Я., Клецкий М. Е., Глуховцев М.Н. Задачи по квантовой теории

7.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 7.1.

Содержание самостоятельной работы обучающихся

Номер раздела (темы)	Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
1.	Основные этапы развития квантовой теории. Квантовая химия как основа современной химической науки.	3	собеседование, тестовый контроль
2.	Жесткий ротатор. Модель свободного электрона.	3	собеседование, тестовый контроль
3.	Решение уравнения Шредингера для точно решаемых задач.	3	собеседование, тестовый контроль
4.	Теория возмущений. Вариационная теорема.	3	собеседование, тестовый контроль
5.	Гелиоподобная задача. L-S связь. Определители Слетера.	3	собеседование, тестовый контроль
6.	Приближение Борна-Оппенгеймера. Подход Бейдера.	3	собеседование, тестовый контроль
7.	Уравнения метода ХФ. Базисные функции Слэтера и Гаусса. Метод МО ЛКАО	3	собеседование, тестовый контроль

8.	Корреляционные диаграммы двухатомных молекул. Активные формы кислорода.	3	собеседование, тестовый контроль
9.	МО малых многоатомных молекул (NH_3 , H_2O).	3	собеседование, тестовый контроль
10.	Диаграмма Уолша для молекулы метана. Расчет молекулы бутадиена-1,3 по методу Хюккеля.	3	собеседование, тестовый контроль
11.	Основные направления развития квантовой химии. Методы компьютерной квантовой химии.	3	собеседование, тестовый контроль

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Примерные вопросы для собеседования Вариант 1

1. Основные этапы развития квантовой теории. Квантовая химия как основа современной химической науки.
2. Жесткий ротатор. Модель свободного электрона.
3. Решение уравнения Шредингера для точно решаемых задач.
4. Теория возмущений. Вариационная теорема.
5. Гелиоподобная задача. L-S связь. Определители Слетера.
6. Приближение Борна-Оппенгеймера. Подход Бейдера.
7. Уравнения метода ХФ. Базисные функции Слэтера и Гаусса. Метод МО ЛКАО
8. Корреляционные диаграммы двухатомных молекул. Активные формы кислорода.
9. МО малых многоатомных молекул (NH_3 , H_2O).
10. Диаграмма Уолша для молекулы метана. Расчет молекулы бутадиена-1,3 по методу Хюккеля.

Вариант 2

1. Основные направления развития квантовой химии. Методы компьютерной квантовой химии.
2. Энергетический спектр простейших систем: частицы в прямоугольном потенциальном ящике, гармонического осциллятора и жесткого ротатора.
3. Классификация молекулярных орбиталей по симметрии. s- и p-орбитали. p-электронное приближение.
4. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридные орбиталии гибридизация.
5. Теория кристаллического поля.
6. Расщепление d- и f-уровней в полях различной симметрии.
5. Химическая связь в комплексных соединениях на основании локализованных орбиталей.
6. Атом водорода с точки зрения теории Бора.
7. Основные характеристики химической связи.
8. Методы исследования структурных свойств молекул и кристаллических соединений.

9. Поясните, что собой представляют конформации молекул и приведите примеры молекул с конформационной изомерией.
10. Каковы основные составляющие и основные типы межмолекулярных взаимодействий?

Вариант 3

1. Операторы квантовой механики. Постулаты квантовой механики.
2. Точно решаемые квантово-механические задачи.
3. Водородоподобный атом. Основы теории групп
4. Угловой момент. Приближенные методы квантовой механики.
5. Спектры и электронные оболочки атомов.
6. МО двухатомных и многоатомных молекул.
7. Метод валентных связей для двухатомных молекул.
8. Электронное строение сопряженных молекул.
9. Метод корреляционных диаграмм Уолша.
10. Концепция локализованных МО. Гибридизация.

Примеры заданий контрольных работ

Вариант 1

1. Каковы основные типы кристаллических решеток?
2. Каковы основные типы дефектов в реальных кристаллах?
3. Сформулируйте правила Гиллеспи-Найхольма.
4. Для частиц BF_3 , NH_3 , IF_3 , NH_4^+ , SeO_2 , –изобразите структурные формулы, определите число связывающих и неподеленных электронных пар, стерическое число и геометрию частиц.
5. Структуры внешнего и предвнешнего электронных слоев атомов элементов следующие: $3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$; $4s^2 4p^6 4d^5 5s^1$; $5s^2 5p^6 5d^4 6s^2$. Назовите эти элементы.
6. Фотон γ -излучения с энергией $1,024 \cdot 10^6$ эВ может образовать пару частиц: электрон и позитрон. Какова масса позитрона?
7. Вычислить энергию и массу, соответствующие фотону, характеризующемуся длиной волны 589 нм.
8. Покажите, какие орбитали и как участвуют в образовании связей в соединении $\text{K}(\text{NH}_3)$.

Вариант 2

1. Как вы считаете, справедливо ли утверждение: если в молекуле AB_n связи полярные, то и сама молекула будет полярной? Ответ подтвердите на примере следующих молекул: BeF_2 , BF_3 , CH_4 , NH_3 , SF_6 , H_2O , CO_2 и SO_2 .
2. По методу МО сравните кратность и энергию связей в ряду частиц: O_2^+ , O_2 , O , O_2^{2-} .
3. Сравните кратность, энергию связей и магнитные свойства частиц: CO^+ , CO^- и CO .
4. Определите геометрическое строение комплексных ионов.
5. Какого типа гибридные орбитали комплексообразователя участвуют в образовании связей с лигандами: $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ - диамагнитный; $[\text{PdCl}_4]^{2-}$ - диамагнитный; $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$; $[\text{AuCl}_4]^-$ - диамагнитный; $[\text{NiF}_4]^-$ - парамагнитный.
6. На основе теории кристаллического поля установите, будут ли диамагнитными или парамагнитными комплексы, в которых лиганды создают сильное поле: $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$; слабое поле: $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$.
7. Какую геометрическую форму имеет ион IO_3^- ?
8. Составьте схему образования частиц BF_4^- и NH_4^+ . Укажите валентность и степень окисления атомов бора и азота.

Критерии оценки ответа студента при выполнении контрольной работы

Оценка	Требования к знаниям
отлично	приведены полные правильные решения, ответы грамотно аргументированы
хорошо	допущены незначительные погрешности при ответах на вопросы, аргументация была не полной
удовлетворительно	в ответах на некоторые вопросы допущены грубые ошибки, часть выводов не аргументирована или аргументирована неправильно
неудовлетворительно	ответы на 50 и более % вопросов ошибочны, большинство выводов не аргументированы или аргументированы неправильно

Примерные контрольные вопросы к экзамену

1. Вариационный принцип и решение уравнения Шредингера.
2. Приближение независимых частиц.
3. Метод самосогласованного поля.
4. Приближение центрального поля.
5. Атомные орбитали и их характеристики.
6. Антисимметричность электронной волновой функции.
7. Детерминант Слейтера.
8. Метод Хартри-Фока.
9. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.
10. Квантовохимическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока.
11. Электронные конфигурации атомов с точки зрения квантовой химии.
12. Приближение Борна-Оппенгеймера.
13. Метод Хартри-Фока для молекул.
14. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана.
15. Ограничения метода Хартри-Фока.
16. Электронная корреляция.
17. Метод конфигурационного взаимодействия.
18. Теорема Бриллюэна.
19. Теория возмущений.
20. Метод валентных связей.
21. Точность учета электронной корреляции.
22. Расчет энергии диссоциации химических связей.
23. Иерархия методов квантовой химии.
24. Неэмпирическая квантовая химия.
25. Типы аналитических базисных функций.
26. Номенклатура базисных наборов.
27. Минимальный базисный набор.
28. Расширенные базисные наборы.
29. Поляризационные и диффузные функции.
30. Атомные базисные наборы.
31. Базисные наборы Попла.
32. Роль базисных функций в описании свойств молекул.

33. Полуэмпирические методы: MINDO, AM1, PM3.
34. Разделение σ - и π -электронов. π -электронное приближение.
35. Метод Парризера-Попла-Парра.
36. Метод MO Хюккеля. Расширенный метод Хюккеля.
37. Расчеты свойств молекул.
38. Точность квантовохимических расчетов химических свойств молекул.
39. Орбитальная картина химической связи.
40. Конструктивная и деструктивная интерференция орбиталей.
41. Молекулярные орбитали и их симметричная классификация.
42. Электронные конфигурации двухатомных молекул.
43. Анализ заселенностей орбиталей по Милликену. Понятие о зарядах и порядках связей.
44. Пространственное распределение электронной плотности.
45. Деформационная электронная плотность.
46. Топологическая теория химической связи.
47. Электростатический аспект описания химической связи. Теорема Гельмана-Фейнмана.
48. Особенности распределения электронной плотности в двухатомных молекулах.
49. Локализация и гибридизация орбиталей.
50. Орбитальное и топологическое обоснование модели отталкивания электронных пар Гиллеспи. Строение многоатомных молекул.
51. Специфика описания химической связи в координационных соединениях.
52. Теория кристаллического поля.
53. Теория поля лигандов.
54. Комплексы сильного и слабого полей. Магнитные свойства комплексов.
55. Эффект Яна-Теллера.
56. Методы расчета энергии межмолекулярного взаимодействия.
57. Оценка ван-дер-ваальсовых атомных радиусов.
58. Специфические невалентные взаимодействия.
59. Водородная связь.
60. Молекулярные комплексы.
61. Квантовохимическое описание химических реакций в газовой фазе. Связь с химической термодинамикой и кинетикой.
62. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ) химической реакции.
63. Путь химической реакции, координата реакции.
64. Переходное состояние или активированный комплекс.
65. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции.
66. Особые точки равновесных и переходных состояний.
67. Правило Вудворда-Хоффмана и его применение для оценки реакционной способности органических соединений.
68. Методы описания химических реакций: теория возмущений, метод координаты реакции, метод граничных молекулярных орбиталей Фукуи.

Примеры экзаменационных билетов

Экзаменационный билет № 1

По дисциплине «Квантовая химия»

1. **Вариационный принцип и решение уравнения Шредингера.**
2. Минимальный базисный набор.
3. Правило Вудворда-Хоффмана и его применение для оценки реакционной способности

органических соединений.

Билет рассмотрен и утвержден на заседании кафедры _____

Зав. кафедрой, профессор

З.Х. Султыгова

Экзаменационный билет № 2

По дисциплине «Коллоидная химия»

1. Приближение независимых частиц.
2. Расширенные базисные наборы.
3. Методы описания химических реакций: теория возмущений, метод координаты реакции, метод граничных молекулярных орбиталей Фукуи.

Билет рассмотрен и утвержден на заседании кафедры _____

Зав. кафедрой, профессор

З.Х. Султыгова

Критерии оценки ответа на экзамене

4-балльная шкала (уровень освоения)	Показатели	Критерии
Отлично (повышенный уровень)	1. Полнота изложения теоретического материала; 2. Полнота и правильность решения практического задания; 3. Правильность и/или аргументированность изложения (последовательность действий);	Студентом дан полный, в логической последовательности развернутый ответ на поставленный вопрос, где он продемонстрировал знания предмета в полном объеме учебной программы, достаточно глубоко осмысливает дисциплину, самостоятельно, и исчерпывающе отвечает на дополнительные вопросы, приводит собственные примеры по проблематике поставленного вопроса, решил предложенные практические задания без ошибок.
Хорошо (базовый)	4. Самостоятельность ответа;	Студентом дан развернутый ответ на поставленный вопрос, где студент демонстрирует знания, приобретенные на

уровень)	5. Культура речи; 6. и т.д.	лекционных и семинарских занятиях, а также полученные посредством изучения обязательных учебных материалов по курсу, дает аргументированные ответы, приводит примеры, в ответе присутствует свободное владение монологической речью, логичность и последовательность ответа. Однако допускается неточность в ответе. Решил предложенные практические задания с небольшими неточностями.
Удовлетворительно (пороговый уровень)		Студентом дан ответ, свидетельствующий в основном о знании процессов изучаемой дисциплины, отличающийся недостаточной глубиной и полнотой раскрытия темы, знанием основных вопросов теории, слабо сформированными навыками анализа явлений, процессов, недостаточным умением давать аргументированные ответы и приводить примеры, недостаточно свободным владением монологической речью, логичностью и последовательностью ответа. Допускается несколько ошибок в содержании ответа и решении практических заданий.
Неудовлетворительно (уровень не сформирован)		Студентом дан ответ, который содержит ряд серьезных неточностей, обнаруживающий незнание процессов изучаемой предметной области, отличающийся неглубоким раскрытием темы, незнанием основных вопросов теории, несформированными навыками анализа явлений, процессов, неумением давать аргументированные ответы, слабым владением монологической речью, отсутствием логичности и последовательности. Выводы поверхностны. Решение практических заданий не выполнено. Т.е студент не способен ответить на вопросы даже при дополнительных наводящих вопросах преподавателя.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Учебная литература:

а) основная:

1. Блохинцев А.И. Основы квантовой механики. –М.: Наука, 1976.
2. Гиллеспи Р. Геометрия молекул. – М.: Мир, 1975.
3. Карапетьянц М.Х. Дракин С.Н. Строение вещества. –М.: Высшая школа, 1977.
4. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. –М.: Высшая школа, 1977.
5. Лер Р. , Марчанд А. Орбитальная симметрия в вопросах и ответах. –М.: Мир, 1976.
6. Мелешина А. М. Курс квантовой механики для химиков.-М.: Высшая школа, 1980.
7. Минкин В.И. , Миняев Р.М. Неклассические структуры органических соединений. – Ростов-на-Дону: РГУ,1985.
8. Минкин В.И. , Миняев Р.М., Симкин Б. Я. Теория строения молекул. –М.: Высшая школа, 1979.
9. Минкин В.И. , Миняев Р.М., Симкин Б. Я.. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. –М.: Химия, 1986.
10. Фларри Р. Квантовая химия. –М.: Мир, 1985.
11. Симкин Б.Я., Клецкий М. Е., Глуховцев М.Н. Задачи по квантовой теории молекул. – Ростов-на-Дону: РГУ, 1992.
12. Хофман Р. Строение твердых тел и поверхностей: взгляд химика – теоретика. –М.: Мир, 1990.
13. Эткинс П. Кванты. Справочник концепций. –М.: Мир,1997.

б) дополнительная:

1. Абаренков И.В., Братцев В.Ф., Тулуб А.В. Начала квантовой химии. –М.: Высшая школа, 1989.
2. Блюменфельд Л.А., Кукушкин А.К. Курс квантовой химии и строения молекул. –М.: МГУ, 1980.
3. Введение в квантовую химию. –М.: Мир, 1982.
4. Давтян О.К. Квантовая химия. –М.: Высшая школа, 1962.
5. Дмитриев И.С. Молекулы без химических связей. –Л.: Химия, 1980.
6. Дяткина М.Е. Основы теории молекулярных орбиталей. –М.: Наука. 1975.
7. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. –М.: Мир, 1979.
8. Кларк Т. Компьютерная химия. –М.: Мир, 1990.
9. Теддер Дж., Нехватал Э. Орбитальная теория в контурных диаграммах. –М.: Мир, 1988.
10. Флайгер У. Строение и динамика молекул. –М.: Мир, 1982. Т. 1,2.
11. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. М.: Мир, 1983.
12. Футзинага С. Метод молекулярных орбиталей. – М.: Мир, 1983.
13. Хигаси К., Баба Х., Рембаум А. Квантовая органическая химия. – М.: Мир, 1967.
14. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. – М.: Химия, 1987.

9.2. Интернет-ресурсы

1. http://c-books.narod.ru/pryanishnikov1_2_1.html
2. <http://alhimic.ucoz.ru/load/26>
3. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/org.html>
4. <http://www.xumuk.ru>
5. <http://chemistry.narod.ru>
6. <http://www.media.ssu.samara.ru/lectures/deryabina/index/html>
7. ChemSoft 2004

9.3. Программное обеспечение

Университет обеспечен необходимым комплектом лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства.

Каждый обучающийся в течение всего периода обучения обеспечен индивидуальным неограниченным доступом к электронной информационно-образовательной среде университета из любой точки, в которой имеется доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» как на территории университета, так и вне ее.

Университет обеспечен следующим комплектом лицензионного программного обеспечения.

1. Лицензионное программное обеспечение, используемое в ИнГГУ
 - 1.1. Microsoft Windows 7
 - 1.2. Microsoft Office 2007
 - 1.3. Программный комплекс ММИС “Визуальная Студия Тестирования”
 - 1.4. Антивирусное ПО Eset Nod32
 - 1.5. Справочно-правовая система “Консультант”
 - 1.6. Справочно-правовая система “Гарант”

Наряду с традиционными изданиями студенты и сотрудники имеют возможность пользоваться электронными полнотекстовыми базами данных:

Таблица 9.1.

Название ресурса	Ссылка/доступ
Электронная библиотека онлайн «Единое окно к образовательным ресурсам»	http://window.edu.ru
«Образовательный ресурс России»	http://school-collection.edu.ru
Федеральный образовательный портал: учреждения, программы, стандарты, ВУЗы, тесты ЕГЭ, ГИА	http://www.edu.ru –
Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов (ФЦИОР)	http://fcior.edu.ru -
ЭБС "КОНСУЛЬТАНТ СТУДЕНТА". Электронная библиотека технического вуза	http://polpred.com/news
Издательство «Лань». Электронно-библиотечная система	http://www.studentlibrary.ru -
Русская виртуальная библиотека	http://rvb.ru –
Издательство «Лань». Электронно-библиотечная система	http://e.lanbook.com -
Еженедельник науки и образования Юга России «Академия»	http://old.rsue.ru/Academy/Archives/Index.htm
Научная электронная библиотека «e-Library»	http://elibrary.ru/defaultx.asp -
Электронно-библиотечная система IPRbooks	http://www.iprbookshop.ru -
Электронно-справочная система документов в сфере образования «Информо»	http://www.informio.ru
Информационно-правовая система «Консультант-плюс»	Сетевая версия, доступна со всех компьютеров в корпоративной сети ИнГГУ
Информационно-правовая система «Гарант»	Сетевая версия, доступна со всех компьютеров в корпоративной сети ИнГГУ
Электронно-библиотечная система «Юрайт»	https://www.biblio-online.ru

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Требования к аудитории для лекционных и практических занятий: бесшумная светлая аудитория на 25 посадочных мест с доской.

Требования к аудитории для лабораторных занятий: лаборатория 60-70 м² с вытяжкой, общим и местным (над шестью рабочими столами) освещением, канализацией (холодная и горячая вода).

Требования к специализированному оборудованию: вытяжной шкаф, химически стойкая раковина, шесть лабораторных столов со стойким покрытием, один стол преподавателя, двенадцать лабораторных стульев, доска, технические и аналитические весы.

Теоретический курс:

1. Лекции, презентации
2. Контрольные тесты – диски и бумажный вариант.
3. Списки вопросов для проведения коллоквиумов.
4. Таблицы.
5. Варианты заданий для контрольных работ.
6. Варианты заданий для самостоятельной расчетной работы.

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Квантовая химия» направлена на формирование компетенций: УК-1, ОПК-3, ПК-1. Промежуточная аттестация предполагает экзамен.

Приступая к изучению дисциплины, необходимо в первую очередь ознакомиться с содержанием рабочей программы дисциплины (РПД).

Лекции имеют целью дать систематизированные основы научных знаний.

При изучении и проработке теоретического материала необходимо:

- повторить законспектированный на лекционном занятии материал и дополнить его с учетом рекомендованной по данной теме литературы;
- при самостоятельном изучении теоретической темы сделать конспект, используя рекомендованные в РПД литературные источники и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»
- при подготовке к промежуточной аттестации по модулю использовать материалы фонда оценочных средств.

Практические занятия проводятся с целью углубления и закрепления знаний, полученных на лекциях и в процессе самостоятельной работы над нормативными документами, учебной и научной литературой.

При подготовке к практическому занятию необходимо:

- изучить, повторить теоретический материал по заданной теме;
- при выполнении домашних расчетных заданий, изучить, повторить типовые задания, выполняемые в аудитории.

Рекомендации по работе с научной и учебной литературой

Работа с учебной и научной литературой является главной формой самостоятельной работы и необходима при подготовке к устному опросу на семинарских занятиях, к модульным контрольным работам, опросу, зачету. Она включает проработку лекционного материала – изучение рекомендованных источников и литературы по тематике лекций. Конспект лекции должен содержать реферативную запись основных вопросов лекции, предложенных преподавателем схем (при их демонстрации), основных источников и литературы по темам, выводы по каждому вопросу. Конспект должен быть выполнен в отдельной тетради по предмету. Он должен быть аккуратным, хорошо читаемым, не содержать не относящуюся к теме информацию или рисунки.

Конспекты научной литературы при самостоятельной подготовке к занятиям должны быть выполнены также аккуратно, содержать ответы на каждый поставленный в теме вопрос, иметь ссылку на источник информации с обязательным указанием автора, названия и года издания используемой научной литературы. Конспект может быть опорным (содержать лишь основные

ключевые позиции), но при этом позволяющим дать полный ответ по вопросу, может быть подробным. Объем конспекта определяется самим обучающимся.

В процессе работы с учебной и научной литературой обучающийся может:

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

Рабочая программа дисциплины «Квантовая химия» составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01. Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от «17» июля 2017г. № 671.

Программу составила:

к.т.н., профессор Р.Д. Арчакова.
(должность, Ф.И.О.)

Программа одобрена на заседании кафедры химии
Протокол № 9 от «20» июня 2022 года

Программа одобрена Учебно-методическим советом химико-биологического факультета
Протокол № 10 от «21» июня 2022 года

Программа рассмотрена на заседании Учебно-методического совета университета
Протокол № 10 от «29» июня 2022г.

Учебный год	Решение кафедры (№ протокола, дата)	Внесенные изменения	Подпись зав. кафедрой