



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**  
ФГБОУ ВО «ИГУ»  
**Кафедра физической и коллоидной химии**



УТВЕРЖДАЮ  
Декан химического факультета, доц.

А.И. Вильмс

«13» мая 2024 г.

**Рабочая программа дисциплины Б1.О.04**

Наименование дисциплины **КВАНТОВАЯ ХИМИЯ**

Направление подготовки **04.04.01 - Химия**

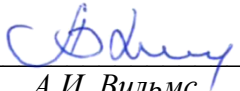
Направленность подготовки: *научно-технологический*

Квалификация выпускника – **МАГИСТР**

Форма обучения **очная**


Согласовано с УМК химического  
факультета

Протокол № 4 от «13» мая 2024 г.

Председатель   
А.И. Вильмс.

Рекомендовано кафедрой физической и  
коллоидной химии:

Протокол № 9 от «26» апреля 2024 г.

И.о. зав. кафедрой   
Белых Л.Б.

Иркутск 2024 г.

## Содержание

1. Цели и задачи дисциплины	стр. 3
2. Место дисциплины в структуре ОПОП.	3
3. Требования к результатам освоения дисциплины	4
4. Содержание и структура дисциплины	5
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов	5
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	
4.3 Содержание учебного материала	9
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	14
6. Материально-техническое обеспечение дисциплины	16
7. Образовательные технологии	16
8. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации	16

## **I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ:**

**Цель:** овладение студентами основами методов и подходов, используемых для теоретического описания свойств и превращений молекулярных систем; формирование современных представлений о природе химической связи и роли квантовых явлений в химии; выработка умения применять адекватный решаемой проблеме подход и способности правильно ориентироваться в иерархической системе квантовохимических расчетных схем.

### **Задачи:**

1. обучить студентов химического факультета основам квантовой химии, приближениям и подходам, используемым для теоретического рассмотрения молекул и атомов на микроскопическом квантовом уровне, наиболее важным понятиям, теориям и расчетным схемам современной квантовой химии, элементам математического формализма квантовой химии;
2. закрепить понятийный аппарат квантовой теории атомов и молекул;
3. сформировать умение применять на практике полученные знания;
4. дать представление о роли и месте квантовой химии в профессиональной деятельности.

## **II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ АОПОП ВО:**

2.1. Дисциплина «Квантовая химия» относится к обязательным для изучения дисциплинам (Б1.О.04).

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами, а именно:

- «Математика» (Б1.О.10),
- «Механика и молекулярная физика» (Б1.О.13),
- «Общая химия. Химия неметаллов» (Б1.О.16),
- «Металлическая связь. Химия металлов» (Б1.О.17),
- «Строение вещества» (Б1.О.29),
- «Квантовая механика» (Б1.О.30).

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- «Компьютерные технологии в науке» (Б1.О.05),
- «Нанохимия» (Б1.О.07),
- «Ядерно-магнитный резонанс» (Б1.В.07),
- «Спектрофотометрический метод анализа» (Б1.В.ДВ.02.01).

Квантовая химия является неотъемлемой составной частью теоретического фундамента современной химии. Этим курсом практически завершается общая химическая подготовка студентов – магистров химии. Содержание курса входит в необходимый минимум профессиональных знаний выпускников химического факультета.

### III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций (элементов следующих компетенций) в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по данному направлению подготовки 04.04.01 «Химия», профиль: научно-технологический.

#### Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
<p><b>ОПК-1</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения</p>	<p><b>ИДК ОПК1.2</b> Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук</p> <p><b>ИДК ОПК1.3</b> Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач</p>	<p><b>Знать:</b> теоретические основы физической и квантовой химии и способы их использования при решении конкретных химических задач.</p> <p><b>Уметь:</b> проводить первичный анализ результатов с учетом общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин; сопоставлять химическую информацию из разных источников, обобщать литературные данные и результаты собственных работ; грамотно формулировать выводы.</p> <p><b>Владеть:</b> навыками критического анализа химической литературы.</p>
<p><b>ОПК-3</b> Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p><b>ИДК ОПК3.2</b> Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p><b>Знать:</b> возможности и границы применимости химических теорий; требования к результатам теоретических расчетов; способы практического использования результатов теоретических расчетов.</p> <p><b>Уметь:</b> пользоваться современным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов.</p> <p><b>Владеть:</b> расчетно-теоретическими методами изучения свойств веществ и процессов с их участием.</p>

#### IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 часов, в том числе 0.97 зачетной единицы, 35 часов на экзамен.

Из них практическая подготовка обучающихся – 18 ч.

Форма промежуточной аттестации: *экзамен*

##### 4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Всего часов	Из них практическая подготовка обучающихся	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа	
					Лекции	Семинарские/практические/лабораторные занятия	Консультации + КСР+КО		
1	Введение	3	1		1	-	-	-	-
2	Математический формализм квантовой химии	3	13	4	4	4	3	4	Проверка контрольных работ, коллоквиум
3	Уравнение Шредингера для молекул	3	5		3	-	1	3	Проверка контрольных работ, коллоквиум
4	Адиабатическое приближение	3	5		2	-	2	2	Проверка контрольных работ, коллоквиум
5	Поверхность потенциальной энергии	3	6	2	2	2	-	3	Проверка

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Всего часов	практическая подготовка	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)			Самостоятельная	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися				
									контрольных работ
6	Ядерная динамика и решение колебательной задачи для ядер	3	11	2	4	2	3	4	Проверка контрольных работ, коллоквиум
7	Электронное уравнение Шредингера	3	4	-	2	-	-	3	Проверка контрольных работ, коллоквиум
8	Спин	3	6	2	2	2	-	3	Проверка контрольных работ, коллоквиум
9	Многоэлектронная волновая функция и ее свойства. Электронные состояния	3	13	4	4	4	3	4	Проверка контрольных работ, коллоквиум
10	Метод Хартри-Фока	3	6	2	2	2	-	3	Проверка контрольных работ, коллоквиум
11	Подход МО ЛКАО и метод Рутаана	3	7	2	2	2	2	3	Проверка контрольных работ, коллоквиум
12	Обзор методов учета электронной корреляции	3	7	-	4	-	2	3	Проверка контрольных работ, коллоквиум
13	Метод DFT и обзор полуэмпирических методов расчета	3	6	-	4	-	-	4	Проверка контрольных работ, коллоквиум

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Всего часов	практическая подготовка	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)			Самостоятельная	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися				
	<b>Итого часов</b>	3	109	18	36	18	16	39	Экзамен

#### 4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
3	Математический формализм квантовой химии	Решение задач		4	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы
3	Уравнение Шредингера для молекул	Решение задач, подготовка к коллоквиуму		3	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы
3	Адиабатическое приближение	Подготовка к коллоквиуму		2	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы
3	Поверхность потенциальной энергии	Решение задач, подготовка к коллоквиуму		3	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы
3	Ядерная динамика и решение колебательной задачи для ядер	Решение задач, подготовка к коллоквиуму		4	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы
3	Электронное уравнение Шредингера	Решение задач, подготовка к коллоквиуму		3	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
3	Спин	Решение задач, подготовка к коллоквиуму		3	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы
3	Многоэлектронная волновая функция и ее свойства. Электронные состояния	Решение задач, подготовка к коллоквиуму		3	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы
3	Метод Хартри-Фока	Решение задач, подготовка к коллоквиуму		4	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы
3	Подход МО ЛКАО и метод Рутаана	Подготовка к коллоквиуму		3	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы
3	Обзор методов учета электронной корреляции	Подготовка к коллоквиуму		3	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы
3	Метод DFT и обзор полуэмпирических методов расчета	Решение задач, подготовка к коллоквиуму		4	Практические задания	См. №№ 1, 2, 5 в списке рекомендуемой литературы
Общий объем самостоятельной работы по дисциплине (час)				<b>39</b>		



### **4.3. Содержание учебного материала**

#### **Содержание разделов и тем дисциплины**

##### **1. Введение**

Предмет квантовой химии. Физическая и химическая составляющие квантовой химии. Основные этапы становления квантовой химии как научной дисциплины. Задачи, решаемые квантовой химией. Что такое приближенный квантовохимический расчетный метод. Неэмпирическая и полуэмпирическая квантовая химия. Место квантовой химии в современном химическом образовании. Роль численного эксперимента и теоретических расчетных методов в химическом исследовании.

##### **2. Математический формализм квантовой химии**

Дираковский формализм.  $n$ -мерное комплексное векторное пространство. Бра и кет векторы. Скалярное произведение. Разложение по базису. Полная система базисных функций. Единичный оператор. Линейные операторы в  $n$ -мерном комплексном пространстве. Соотношение эрмитовости для операторов. Эрмитовы (самосопряженные) операторы. Правила для получения эрмитово сопряженных выражений, содержащих операторы, матричные элементы, бра и кет векторы.

##### **3. Уравнение Шредингера для молекул**

Уравнение Шредингера для молекул. Молекулярный гамильтониан. Физические взаимодействия в молекулярных системах, обычно рассматриваемые в квантовой химии. Неучитываемые взаимодействия (на основании значимости соответствующих эффектов для химии). Множество решений молекулярного уравнения: основное и возбужденные состояния. Электронное уравнение Шредингера. Уравнение Шредингера ядерной подсистемы. Связь электронных и ядерных движений. Параметрическая зависимость электронной волновой функции от ядерных координат. Двухэтапный подход к решению электронно-ядерной задачи.

##### **4. Адиабатическое приближение**

Физическое обоснование возможности разделения электронных и ядерных степеней свободы. Математические аспекты разделения – оператор неадиабатичности (вибронного связывания). Адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера. Алгоритм решения электронно-ядерной задачи в приближении Борна-Оппенгеймера. Границы применимости и примеры нарушения адиабатического приближения.

##### **5. Поверхность потенциальной энергии**

Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Внутренние координаты и отделение вращательных и поступательных степеней свободы. Анализ ППЭ: способы визуализации; критические точки; гессиан; типы критических точек. Оптимизация геометрических

параметров молекулы: поиск минимумов и переходных состояний на ППЭ. Барьер и термодинамический эффект реакции. ППЭ основного и возбужденных (ионизированных) состояний. Роль ППЭ в химии и границы применимости понятия ППЭ.

## **6. Ядерная динамика и решение колебательной задачи для ядер**

Ключевые моменты решение задачи о колебаниях ядер в гармоническом приближении и приближении Борна-Оппенгеймера. Силовые постоянные. Нормальные координаты. Вид колебательного ядерного гамильтониана в нормальных координатах. Колебательные моды и энергии нормальных колебаний. Полная колебательная энергия молекулы. Энергия нулевых колебаний и ее значение для анализа термодинамической устойчивости молекул. Применение результатов решения колебательной задачи в квантовой химии: расчет термодинамических величин и спектроскопические приложения. Границы применимости гармонического приближения.

## **7. Электронное уравнение Шредингера**

Электронное уравнение Шредингера. Электронный гамильтониан и проблемы, связанные с решением многоэлектронной задачи. Межэлектронное взаимодействие. Решение многоэлектронной задачи посредством аппроксимации межэлектронного взаимодействия эффективным одноэлектронным потенциалом. Одноэлектронное приближение. Одноэлектронные волновые функции (орбитали). Построение многоэлектронных волновых функций из одноэлектронных. Электронные конфигурации. Принцип aufbau. Представление многоэлектронной волновой функции в виде разложения по полному конфигурационному базису. Полное конфигурационное взаимодействие (ПКВ).

## **8. Спин**

Спин электрона. Спиновые операторы. Спиновые степени свободы электрона. Спин-орбитали. Спиновые функции и их свойства.

## **9. Многоэлектронная волновая функция и ее свойства. Электронные состояния**

Свойства многоэлектронных волновых функций. Принцип Паули. Детерминант Слэтера. Спиновая и орбитальная (пространственная) симметрия. Электронные оболочки. Электронные конфигурации с закрытой и открытой оболочкой. Построение многоэлектронных волновых функций правильной симметрии. Микросостояния. Правила сложения моментов количества движения (орбитального, спинового). Понятие об электронном состоянии (терме) атома и молекулы. Орбитальное и спиновое вырождение состояний.

## 10. Метод Хартри-Фока

Метод Хартри-Фока (ХФ) для систем с закрытой оболочкой. Функционал энергии и вариационный принцип для нахождения орбиталей. Фокиан. Система уравнений ХФ. Канонические орбитали и другие эквивалентные виды орбиталей. Орбитальные энергии и теорема Купманса. Самосогласованное поле (ССП). Полная энергия в методе ХФ. Физическое содержание приближения ХФ. Эффективный ХФ потенциал. Точный и ХФ электронные гамильтонианы. Энергия электронной корреляции. Ограниченный и неограниченный методы ХФ.

## 11. Подход МО ЛКАО и метод Рутаана

Подход МО ЛКАО. Минимальные и расширенные базисы АО. Базисные наборы, применяемые в квантовохимических расчетах: орбитали слэитеровского и гауссова типа. Уравнения ХФ и их решение в приближении МО ЛКАО (подход Рутаана). Матрица плотности. Электронные заселенности и заряды на атомах.

## 12. Обзор методов учета электронной корреляции

Уточнение результатов одноэлектронного приближения – методы учета электронной корреляции. Вариационные подходы: конфигурационное взаимодействие (КВ) и метод многоконфигурационного СП (МКСП). Пертурбативные подходы: метод теории возмущений Мёллера-Плессета и метод связанных кластеров. Иерархия основных приближенных расчетных схем. Статическая и динамическая электронная корреляция.

## 13. Метод DFT и обзор полуэмпирических методов расчета

Метод функционала плотности (DFT). Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии. Метод Хюккеля.

### 4.3.1. Перечень практических занятий

№ п/п	№ раздела и темы дисциплины (модуля)	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (часы)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	Коллоквиум по теме «Квантовая химия. Линейная алгебра»	2	Устная беседа; практические задания по теме	ОПК-1 ОПК-3
2	2	Коллоквиум по теме «Дираковский формализм»	2	Практические задания по теме	ОПК-1 ОПК-3

3	5	Коллоквиум по теме «Поверхность потенциальной энергии»	2	Устная беседа; практические задания по теме	ОПК-1 ОПК-3
4	6	Коллоквиум по теме «Решение колебательной задачи для ядер»	2	Устная беседа; практические задания по теме	ОПК-1 ОПК-3
5	8	Коллоквиум по теме «Электронное уравнение. Спин»	2	Устная беседа; практические задания по теме	ОПК-1 ОПК-3
6	9	Коллоквиум по теме «Свойства волновой функции»	2	Устная беседа; практические задания по теме	ОПК-1 ОПК-3
7	9	Коллоквиум по теме «Электронные состояния»	2	Устная беседа; практические задания по теме.	ОПК-1 ОПК-3
8	10	Коллоквиум по теме «Метод Хартри-Фока»	2	Устная беседа; практические задания по теме	ОПК-1 ОПК-3
9	11	Коллоквиум по теме «Подход МО ЛКАО»	2	Устная беседа; практические задания по теме	ОПК-1 ОПК-3

#### 4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов

№ п/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	Математический формализм квантовой химии	Блок из 10 задач. Решение задач и оформление отчета.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2
2	Адиабатическое приближение и ядерная динамика	Блок из 10 задач. Решение задач и оформление отчета.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2
3	Электронное уравнение	Блок из 10 задач. Решение задач и оформление отчета.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3

	Шредингера и многоэлектронные состояния			ОПК-3.2
4	Волновая функция молекулы. Молекулярный гамильтониан. Уравнение Шредингера для молекул.	Подготовка к контрольной работе № 1. Подготовка к коллоквиуму.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2
5	Дираковский формализм. Волновая функция как вектор. Линейное векторное пространство.	Подготовка к контрольной работе № 2. Подготовка к коллоквиуму.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2
6	Общий подход к решению электронно-ядерной задачи. Уравнения электронной и ядерной подзадач. Адиабатическое приближение.	Подготовка к контрольной работе № 3. Подготовка к коллоквиуму.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2
7	Гармоническое приближение. Колебательные волновые функции и уровни энергии в гармоническом приближении.	Подготовка к контрольной работе № 4. Подготовка к коллоквиуму.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2
8	Электронный гамильтониан. Одноэлектронное приближение. Построение многоэлектронных волновых функций из одноэлектронных.	Подготовка к контрольной работе № 5. Подготовка к коллоквиуму.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2
9	Решение электронной задачи: линейный вариационный подход и метод теории возмущений.	Подготовка к контрольной работе № 6. Подготовка к коллоквиуму.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2

#### 4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с закреплением теоретического материала в виде решения задач и подготовке к коллоквиумам, проводится во

внеаудиторное время. Примеры решения типовых задач представлены в рекомендуемых учебных пособиях.

#### **4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)**

Курсовые работ (проекты) не предусмотрены.

### **V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

#### **а) основная литература**

1. Трофимов, А.Б. Введение в квантовую химию [Текст] : учеб. пособие / А. Б. Трофимов; рец.: Н. М. Витковская, В. К. Станкевич ; Иркутский гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2013. - 192 с. ; 25 см. - Библиогр.: с. 180-181. - ISBN 978-5-9624-0828-6 : 41 экз.+
2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия : Учеб. пособие / В. И. Барановский. - М. : Академия, 2008. - 383 с. - (Высшее профессиональное образование: Естественные науки). - Библиогр.: с. 379-380. - ISBN 978-5-7695-3961-9 (21 см) : 25 экз.+
3. Витковская, Н.М. Основы теории групп и ее химические приложения [Текст] : учеб. пособие / Н. М. Витковская, В. Б. Кобычев ; рец.: В. В. Сараев, Е. Ю. Ларионова ; Иркутский гос. ун-т. - Иркутск : Аспринт, 2014. - 107 с. ; 20 см. - Библиогр.: с. 97. - ISBN 978-5-4340-0034-5 : 44 экз.+
4. Кобычев, В.Б. Квантовая химия на ПК [Текст] : компьютерное моделирование молекулярных систем: Учеб.-метод. пособие / В. Б. Кобычев ; Иркутский гос. ун-т. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2006. - 87 с. : ил. ; 20 см. - Библиогр.: с. 87. 21 экз.+
5. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учеб. пособие : учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по хим.-технол. направл. и спец. / В. Г. Цирельсон. - 2-е изд. - ЭВК. - М. : Бином. Лаборатория знаний, 2012. - Режим доступа: . - Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотех". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-9963-1098-2 :+

#### **б) дополнительная литература**

6. Майер, И. Избранные главы квантовой химии [Электронный ресурс] / И. Майер. - Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 384 с. - Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=50535](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=50535). - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - Библиогр. в конце гл. - Предм. указ.: с. 374-378. - ISBN 978-5-9963-2313-5 :
7. Кобычев, В.Б. Квантовая механика для химиков. Конспекты лекций [Текст] : учеб. пособие / В. Б. Кобычев, А. Б. Трофимов, Н. М. Витковская ; рец.: В. В. Сараев, Е. Ю. Ларионова ; Иркут. гос. ун-т. - Иркутск : Аспринт, 2015 - . - 20 см. Ч. 1 :

Математический аппарат. Точные решения. - 2015. - 119 с. - Библиогр.: с. 119. - ISBN 978-5-4340-0059-8 : 45 экз.

8. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] : учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по хим.-технол. направл. и спец. / В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М. : Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. : ил., [12] вкл. л. цв. ил. ; 24 см. - (Учебник для высшей школы). - Библиогр. в конце глав. - Библиогр.: с. 485-487. - Предм. указ.: с. 488-495. - ISBN 978-5-9963-1668-7 : 5 экз.
9. Валл, А.Н. Квантовая механика в задачах [Электронный ресурс] : учеб.-метод. пособие / А. Н. Валл. - ЭВК. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2010. - Режим доступа: . - Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотех". - Неогранич. доступ.



**в) периодические издания** (*при необходимости*)

**г) список авторских методических разработок**

**д) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы**

В курсе лекций и на практических занятиях используются результаты, полученные при помощи свободно распространяемого программного обеспечения:

- ChemSketch и сопутствующие программы пакета ACDLABS 12.0 (3D-Viewer, ACD Free Name, средства доступа к БД),
- Firefly – программа неэмпирических расчетов [Alex A. Granovsky, Firefly version 8, [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)],
- Molden – программа подготовки данных и визуализации результатов расчетов молекулярной электронной структуры [G.Schaftenaar and J.H. Noordik, "Molden: a pre- and post-processing program for molecular and electronic structures", J. Comput.-Aided Mol. Design, 14 (2000) 123-134, <http://www.cmbi.ru.nl/molden/>],

а также базы данных:

1. <http://webbook.nist.gov/chemistry> –

База данных Национального бюро стандартов США, содержит ряд экспериментальных и расчетных данных о молекулах в газовой фазе.

Следующие БД доступны непосредственно из ChemSketch:

2. <http://www.chemspider.com> –

база данных химических соединений и смесей, принадлежащая королевскому химическому обществу Великобритании;

3. <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> –

база данных химических соединений и смесей, являющаяся общественным достоянием. Обслуживается Национальным центром биотехнологической информации США (NCBI);

4. <http://www.emolecules.com> –

база данных поставщиков химических веществ, и биохимических препаратов.

## **VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

Помещения для проведения лекционных и практических занятий, укомплектованные необходимым оборудованием, а именно:

– аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий (ауд. 303, 402, 426); ауд. 5, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU.

– компьютерный класс кафедры физической и коллоидной химии (ауд. 303). Общее количество единиц вычислительной техники – 5: Pentium IV – 1 шт.; Pentium III – 1 шт.; Pentium I – 3 шт. Имеется локальная сеть.

### **6.2. Программное обеспечение**

### **6.3. Технические и электронные средства**

## **VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**

В процессе изучения дисциплины используются как традиционные, так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения. При прохождении дисциплины «Квантовая химия» предусмотрены:

- 1) лекции с применением
  - а) технологий объяснительно-иллюстративных объяснений,
  - б) объяснительно-иллюстративный метода с элементами проблемного изложения;
  - в) разбора конкретных ситуаций.
- 2) во время сдачи коллоквиумов обсуждаются вопросы лекций, проводится решение типовых и ситуационных задач;
- 3) самостоятельная работа студентов, включающая подготовку к коллоквиумам в форме изучения теоретического материала лекций; подготовку к текущему контролю успеваемости;
- 4) консультирование студентов по изучаемым теоретическим и практическим вопросам.

## **VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ**

### **Оценочные материалы (ОМ):**

Оценочные материалы текущего контроля формируются в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе университета. Назначение оценочных средств текущего контроля - выявить у обучающихся сформированность компетенций:

### **Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:**

Назначение оценочных средств текущего контроля - выявить сформированность у обучающихся соответствующих компетенций.



Для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации разработаны ОМ, которые включают проверку решения задач, устный опрос по темам во время проведения коллоквиумов, решение задач, выполнение контрольных заданий.

**Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:**

№	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1	Собеседование в форме коллоквиума	Квантовая химия. Линейная алгебра	ОПК-1 ОПК-3
2	Собеседование в форме коллоквиума	Дираковский формализм	ОПК-1 ОПК-3
3	Собеседование в форме коллоквиума	Поверхность потенциальной энергии	ОПК-1 ОПК-3
4	Собеседование в форме коллоквиума	Решение колебательной задачи для ядер	ОПК-1 ОПК-3
5	Собеседование в форме коллоквиума	Электронное уравнение. Спин	ОПК-1 ОПК-3
6	Собеседование в форме коллоквиума	Свойства волновой функции	ОПК-1 ОПК-3
7	Собеседование в форме коллоквиума	Электронные состояния	ОПК-1 ОПК-3
8	Собеседование в форме коллоквиума	Метод Хартри-Фока	ОПК-1 ОПК-3
9	Собеседование в форме коллоквиума	Подход МО ЛКАО	ОПК-1 ОПК-3
10	КР	Волновая функция молекулы. Молекулярный гамильтониан. Уравнение Шредингера для молекул.	ОПК-1 ОПК-3
11	КР	Дираковский формализм. Волновая функция как вектор. Линейное векторное пространство.	ОПК-1 ОПК-3
12	КР	Общий подход к решению электронно-ядерной задачи. Уравнения электронной и ядерной подзадач. Адиабатическое приближение.	ОПК-1 ОПК-3
13	КР	Гармоническое приближение. Колебательные волновые функции и уровни энергии в гармоническом приближении.	ОПК-1 ОПК-3

14	КР	Электронный гамильтониан. Одноэлектронное приближение. Построение многоэлектронных волновых функций из одноэлектронных.	ОПК-1 ОПК-3
15	КР	Решение электронной задачи: линейный вариационный подход и метод теории возмущений.	ОПК-1 ОПК-3

### Демонстрационный вариант контрольной работы

#### *Пример 1.*

Письменно раскрыть заданные темы (дать основные определения, привести соответствующие формулы и пояснения).

**Вариант 1:** Волновая функция молекулы. Общие свойства. Использование.

**Вариант 2:** Молекулярный гамильтониан. Уравнение Шредингера для молекул и его решения.

#### *Пример 2.*

Письменно раскрыть заданные темы (дать основные определения, привести соответствующие формулы и пояснения).

**Вариант 1:** Общий подход к решению электронно-ядерной задачи. Уравнения электронной и ядерной подзадач.

**Вариант 2:** Адиабатическое приближение. Интерпретация. Границы применимости. Примеры нарушения.

#### *Пример 3.*

Письменно раскрыть заданные темы (дать основные определения, привести соответствующие формулы и пояснения).

**Вариант 1:** Линейный вариационный подход (ВП) для решения электронной задачи: постановка задачи, основные идеи и уравнения.

**Вариант 2:** Метод теории возмущений (ТВ) для решения электронной задачи: постановка задачи, основные идеи и уравнения.

## ВОПРОСЫ ДЛЯ СОБЕСЕДОВАНИЯ

### Коллоквиум 1. Квантовая химия. Линейная алгебра

1. Что изучает квантовая химия?
2. Почему квантовая химия не сводится к квантовой механике молекул?
3. В чем состоит химическая составляющая квантовой химии?
4. Какие задачи решает квантовая химия?
5. Что такое приближенный квантовохимический расчетный метод?

6. С чем связано бурное развитие квантовой химии во второй половине 20 века?
7. Почему нужно изучать квантовую химию?
8. Заменит ли квантовая химия в будущем химический эксперимент?
9. Основные понятия линейной алгебры, используемые в квантовой химии.
10. Конечномерное векторное пространство, линейная (не)зависимость, базис, скалярное произведение, ортогональность, нормированность, полная система базисных векторов.
11. Комплексные и вещественные величины. Сопряженные величины.
12. Операторы (линейные преобразования). Эрмитовы, унитарные и ортогональные операторы.
13. Задача на собственные значения для эрмитового (самосопряженного) оператора.
14. Матрицы и операции над ними. Различные случаи матричных и векторных произведений. Нахождение обратной матрицы
15. Детерминант и его свойства.

### **Коллоквиум 2. Дираковский формализм**

1. Дираковский формализм: новая математика или новая система обозначений?
2. Зачем нужен и что дает дираковский формализм?
3. Как произошли названия "бра" и "кет"?
4. Привести различные примеры "бра" и "кет" векторов.
5. Привести примеры различного определения скалярного произведения в дираковских обозначениях.
6. Единичный оператор (условие полноты) в дираковском формализме.
7. Примеры использования единичного оператора для вывода и упрощения выражений.
8. Интерпретация операторов с использованием дираковского формализма.
9. Привести правила для составления эрмитово сопряженных выражений с использованием дираковского формализма.
10. Как можно интерпретировать коэффициенты разложения по ортогональному базису с использованием дираковского формализма?

### **Коллоквиум 3. Поверхность потенциальной энергии**

1. Какие взаимодействия описывают члены, входящие в гамильтониан, используемый в квантовой химии?
2. Как можно обосновать учет лишь этих членов и пренебрежение другими взаимодействиями?
3. Какие типы взаимодействий вообще могут иметь место в молекулярной системе?
4. Каков порядок величины энергии различных взаимодействий и какими физическими методами они могут быть исследованы?
5. Какому состоянию соответствует низшее по энергии решение молекулярного уравнения Шредингера, какой смысл имеют решения с более высокой энергией?
6. Сколько решений имеет уравнение Шредингера для молекулы?
7. В чем отличие молекулярного гамильтониана от атомного?
8. Почему нельзя разделить электронные и ядерные координаты? Какой член в

- гамильтониане (оператор) связывает электронные и ядерные движения?
9. Какие величины в молекулярном уравнении Шредингера параметрически зависят от ядерных координат? Что такое параметрическая зависимость?
  10. Как можно не вводя приближений преобразовать молекулярное уравнение Шредингера, чтобы сделать возможным последовательное решение сначала электронной, а затем ядерной задач?
  11. Какими физическими соображениями можно обосновать разделение электронных и ядерных движений?
  12. В чем заключается физическая суть адиабатического приближения?
  13. Что такое оператор неадиабатичности? Почему он также называется оператором вибронного связывания? На что он действует, что и за счет чего связывает?
  14. Как математически вводится адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера?
  15. Каков критерий применимости адиабатического приближения?
  16. Что описывают ядерные волновые функции?
  17. Какое из высказываний верно и почему: а) "В адиабатическом приближении с каждым электронным состоянием связан свой набор состояний ядерной подсистемы", б) "В адиабатическом приближении с каждым состоянием ядерной подсистемы связан свой набор электронных состояний"?
  18. Что такое поверхность потенциальной энергии? Всегда ли применимо это понятие?
  19. Что такое неадиабатическая ядерная динамика и вибронное взаимодействие?
  20. Что такое поверхность потенциальной энергии (ППЭ)?
  21. Все ли возможные степени свободы ядерной подсистемы являются аргументами функции потенциальной энергии? Если не все, то какие виды движения ядер в молекуле не изменяют потенциальную энергию системы?
  22. При рассмотрении ядерной динамики и ППЭ часто упоминаются координаты, число которых в N-атомной линейной и нелинейной молекуле равно  $3N-5$  и  $3N-6$ , соответственно? Что это за координаты?
  23. Во всех ли случаях применимо понятие ППЭ? Если не во всех, то в каких применимо, а в каких нет?
  24. Как получается ППЭ?
  25. Как можно изобразить (представить графически или численно) ППЭ?
  26. Какие типы критических точек (экстремумов) существуют на ППЭ?
  27. Какая информация необходима для того чтобы полностью охарактеризовать тип критической точки?
  28. Критические точки какого типа представляют интерес для химии и почему?

#### **Коллоквиум 4. Решение колебательной задачи для ядер**

1. Какой тип движений характерен для ядер молекулы, находящейся в равновесной конфигурации?
2. Можно ли решить ядерную задачу, если адиабатическое приближение выполняется и известна ППЭ? В чем заключаются трудности?
3. Что такое гармоническое приближение (ГП) для точки минимума на ППЭ? Функцией какого типа аппроксимируется ППЭ в ГП? В какой области такое

приближение является удовлетворительным?

4. К каким упрощениям колебательного гамильтониана приводит переход к нормальным координатам? Что такое нормальные колебательные моды?
5. Как связан колебательный гамильтониан в нормальных координатах с гармоническим осциллятором?
6. Каким выражением определяется энергия индивидуальных нормальных колебаний и полная энергия? Что такое энергия нулевых колебаний?
7. Как можно графически представить набор решений колебательного уравнения Шредингера в гармоническом приближении в случае двухатомной молекулы?
8. Что такое ангармонизм? В каких случаях он важен?

#### **Коллоквиум 5. Электронное уравнение. Спин**

1. Какие взаимодействия описывают члены, входящие в электронный гамильтониан?
2. Почему нельзя разделить электронные переменные? Какой оператор препятствует этому?
3. Что такое одноэлектронное приближение и как оно может быть реализовано?
4. Что такое орбиталь? Что такое атомная (молекулярная) орбиталь?
5. Какой ответ правильный. В одноэлектронном приближении полный гамильтониан является а) суммой б) произведением одноэлектронных гамильтонианов. В одноэлектронном приближении многоэлектронная волновая функция может быть построена как а) сумма б) произведение одноэлектронных волновых функций.
6. Для системы из  $n$ -электронов найти выражения, описывающие число однократно возбужденных конфигураций, двукратно возбужденных конфигураций,  $n$ -кратно возбужденных конфигураций.
7. Можно ли точно решить электронное уравнение Шредингера для системы из  $n$ -электронов? Если да, то как?
8. Что такое спин электрона?
9. История открытия спина. Классические опыты и их интерпретация, приведшие к необходимости введения спина электрона. Какой раздел квантовой теории указывает на существование спина?
10. В чем суть явления ЭПР?
11. Какие частицы кроме электрона имеют спин? Что такое бозоны и фермионы?
12. Какие операторы связаны со спиновой частью волновой функции? Что можно сказать о собственных значениях этих операторов? Какие соотношения существуют между спиновыми операторами?
13. Как определены спиновые функции  $|\alpha\rangle$  и  $|\beta\rangle$  и какими свойствами обладают?
14. Что такое спин-орбиталь? Какие особенности имеет вычисление матричных элементов независимых от спина операторов между спин-орбиталями?

#### **Коллоквиум 6. Свойства волновой функции**

1. В чем состоит суть принципа Паули?
2. Что такое бозоны и фермионы. В чем разница между ними?
3. Что такое принцип "запрета" Паули.

4. Почему использование детерминанта Слэйтера при построении многоэлектронной функции из одноэлектронных позволяет удовлетворить принципу Паули?
5. Собственной функцией каких операторов должна быть многоэлектронная волновая функция атома и молекулы?
6. Почему можно классифицировать уровни энергии по собственным значениям операторов, характеризующим пространственную и симметрию волновой функции?
7. Что такое спиновая симметрия?
8. Что такое волновая функция правильной симметрии?
9. Является ли детерминант Слэйтера функцией правильной симметрии?
10. Как в общем случае может быть построена волновая функция правильной симметрии с использованием детерминантов Слэйтера.
11. Какими квантовыми числами характеризуется в общем случае детерминант Слэйтера?
12. Что такое конфигурация?
13. Как может быть разложена многоэлектронная функция по одноэлектронным функциям?
14. Что такое полное конфигурационное пространство?
15. В каком случае разложение многоэлектронной функции по одноэлектронным будет точным, а в каком случае приближенным?
16. Назвать две основные причины, по которым разложение волновой функции по конфигурациям может быть не точным.
17. Что такое одноконfigurационное приближение? В каком случае оно оправдано?
18. Что такое конфигурация основного состояния?
19. Сколько конфигураций в общем случае (без учета пространственной и спиновой симметрии) может быть всего построено для системы, состоящей из  $n$ -орбиталей и  $N$ -электронов?
20. Как обычно изображаются конфигурации?

#### **Коллоквиум 7. Электронные состояния**

1. Что такое электронный терм?
2. Обозначения термов в атомах.
3. Обозначения термов и молекулах.
4. Вырождение термов в отсутствии поля. Раскрыть причины.
5. Что происходит с термами при приложении внешнего поля.
6. Как определяется электронная оболочка?
7. Что значит открытая (закрытая) оболочка?
8. Что такое микросостояния и какими квантовыми числами они могут быть охарактеризованы?
9. Какие термы порождают различные электронные конфигурации атомов и молекул с открытой оболочкой?
10. Что такое конфигурации эквивалентных и неэквивалентных электронов?
11. Как подсчитать число термов в конфигурации неэквивалентных электронов?
12. Как подсчитать число термов в конфигурации эквивалентных электронов?

13. Как формулируется общее квантовомеханическое правило сложения моментов количества движения?
14. Пояснить и сопоставить друг с другом (где это уместно) понятия: орбиталь, спин-орбиталь, оболочка, конфигурация, микросостояние.

#### **Коллоквиум 8. Метод Хартри-Фока**

1. Что такое функционал энергии?
2. Как строится волновая функция в методе Хартри-Фока?
3. Что такое канонические орбитали?
4. Что такое множители Лагранжа?
5. Для определения каких величин служат уравнения Хартри-Фока?
6. Почему уравнения Хартри-Фока называются интегро-дифференциальными?
7. В чем суть процесса самосогласования при решении уравнений Хартри-Фока методом ССП?
8. Равна ли полная энергия в приближении Хартри-Фока сумме орбитальных энергий?
9. Почему метод Хартри-Фока считается одноэлектронным приближением?
10. Что такое Хартри-Фоковский потенциал?
11. О чем говорит теорема Купманса?
12. Равна ли энергия перехода электрона с занятой орбитали на вакантную в приближении ХФ разности соответствующих орбитальных энергий?
13. В чем отличия ограниченного варианта метода ХФ от неограниченного?
14. Может ли метод Хартри-Фока использоваться для расчета систем с открытыми оболочками?
15. Можно ли по методу Хартри-Фока рассчитывать возбужденные состояния?

#### **Коллоквиум 9. Подход МО ЛКАО**

1. Что означает сокращение МО ЛКАО?
2. На сколько физически обоснованным является представление о том, что молекулярные орбитали образуются из атомных?
3. Почему для проведения практических квантовохимических расчетов удобно использование базисных наборов, составленных из аналитических функций того или иного типа.
4. Что такое функции Гауссова и Слэйтеровского типа? Какие типы базисных наборов существуют?
5. Какой ключевой шаг необходим для получения уравнений ХФ в форме Рутаана?
6. Что является варьируемым параметром в методе Рутаана?
7. Как выглядят и как решаются уравнения Рутаана?
8. Что такое матрица плотности?
9. Какой вид имеет формула для вычисления полной энергии в методе Рутаана?
10. Что такое энергия электронной корреляции?
11. В чем суть вариационного подхода к решению задачи учета энергии электронной корреляции? Как строится волновая функция в методах КВ и МК ССП? Какие величины являются варьируемыми параметрами в первом и втором случае?

12. Какие способы иерархической классификации приближенных схем могут быть предложены для методов КВ и МКССП? Какие варианты этих методов являются наиболее распространенными в настоящее время?
13. В чем суть пертурбативного (основанного на теории возмущений) подхода к решению задачи учета энергии электронной корреляции? Как разбивается гамильтониан на невозмущенную часть и возмущение? Что представляет собой оператор возмущения?
14. Какие способы иерархической классификации приближенных схем могут быть предложены для методов теории возмущений и связанных кластеров? Какие варианты этих методов являются наиболее распространенными в настоящее время?
15. В каких ситуациях необходим выход за рамки приближения ХФ? Каким методам учета электронной корреляции и в каких случаях следует отдавать предпочтение?
16. Почему методы учета электронной корреляции являются более трудоемкими в вычислительном плане, чем метод ХФ?
17. В чем состоит основная идея метода функционала плотности (DFT)?
18. В чем состоят отличия метода DFT от метода ХФ? Какие типы функционалов используются в методе DFT?
19. Чем можно объяснить широкое применение метода DFT в современных квантовохимических расчетах?
20. Что такое полуэмпирические методы квантовой химии? Какие приближения вводятся в полуэмпирических схемах и какие величины являются параметрами (не рассчитываются)?
21. Какая существует классификация полуэмпирических методов?
22. В чем суть метода Хюккеля ( $\pi$ -приближение, дальнейшие приближения, параметры  $\alpha$  и  $\beta$ )?
23. Какое место занимают полуэмпирические методы в современной теоретической химии?

### **ПРИМЕРНЫЙ СПИСОК ВОПРОСОВ К ЭКЗАМЕНУ:**

1. Предмет квантовой химии. Физическая и химическая составляющие квантовой химии. Этапы становления. Приближенный квантовохимический расчетный метод. Неэмпирическая и полуэмпирическая квантовая химия. Задачи, решаемые квантовой химией.
2. Элементы линейной алгебры в квантовой химии. Линейное векторное пространство. Скалярное произведение. Базис. Ортогональность и нормированность.
3. Дираковский формализм. Бра- и кет-векторы. Задача о разложении по базису. Единичный оператор.
4. Вариационная теорема Релея в дираковском формализме.
5. Линейный вариационный принцип в дираковском формализме.
6. Уравнение Шредингера для молекул. Молекулярный гамильтониан. Учитываемые и неучитываемые взаимодействия. Основные проблемы, связанные с видом



- операторов. Волновые функции и квантовые состояния молекулярных систем.
7. Разделение переменных в уравнении Шредингера и уравнениях на собственные значения. Выражения для собственных значений и собственных функций в случае, если переменные разделяются.
  8. Электронно-ядерная задача. Общий подход к ее решению путем представления ее в виде двух связанных между собой электронной и ядерной подзадач. Система уравнений для нахождения энергий электронно-колебательных уровней.
  9. Адиабатическое приближение. Электронно-ядерная задача в адиабатическом приближении. Границы применимости адиабатического приближения.
  10. Поверхность потенциальной энергии. Интерпретация адиабатического приближения и границы его применимости. Нарушение адиабатического приближения.
  11. Анализ поверхности потенциальной энергии (ППЭ). Отделение вращательных и поступательных степеней свободы. Способы визуализации ППЭ. Роль ППЭ в химии.
  12. Анализ поверхности потенциальной энергии (ППЭ). Критические точки на ППЭ. Оптимизация геометрии и поиск переходных состояний.
  13. Ядерная задача в гармоническом приближении. Гармоническое приближение. Колебательный гамильтониан в гармоническом приближении. Нормальные координаты и нормальные моды.
  14. Решение колебательной задачи в гармоническом приближении. Полная электронно-колебательная энергия. Колебательные уровни молекулы. Энергия нулевых колебаний.
  15. Вертикальные и адиабатические переходы. Спектры электронных возбуждений и ионизации. Электронные состояния. Обратная спектроскопическая задача.
  16. Энергии и интенсивности электронно-колебательных переходов. Принцип Франка-Кондона.
  17. Фотохимия. Адиабатические и неадиабатические фотохимические реакции. Фотохимическая реакция цис-транс изомеризации. Внутренняя конверсия.
  18. Обзор важнейших фотофизических процессов. Типичные размеры атомно-молекулярных систем, характеристические энергии и времена относящихся к ним взаимодействий и процессов.
  19. (Вопрос на проверку владения терминологией и важнейшими понятиями). Дать определение (кратко пояснить): электронные, колебательные, вращательные уровни энергии; вибронное взаимодействие; адиабатическая – неадиабатическая ядерная динамика; коническое пересечение; излучательный – безизлучательный переход.
  20. (Вопрос на проверку владения терминологией и важнейшими понятиями). Кратко охарактеризовать (раскрыть) физическую природу переходов, наблюдаемых в спектрах: фотоэлектронных; поглощения видимого и УФ диапазона; ИК и КР; микроволновых; ЭПР. Какие электронные процессы и переходы лежат в основе рентгеноспектрального анализа.
  21. Электронная задача квантовой химии. Электронное уравнение Шредингера. Электронная волновая функция. Общее рассмотрение. Физический смысл членов электронного гамильтониана и проблемы, связанные с ними.

22. Электронная задача квантовой химии. Формулировка электронной задачи в рамках вариационного подхода. Разложение многоэлектронной функции. Конфигурационный базис. Конфигурационное взаимодействие.
23. Электронная задача квантовой химии. Одноэлектронное приближение. Физические основы одноэлектронного приближения. Одноэлектронные волновые функции и их свойства (раскрыть понятия: орбиталь, атомная и молекулярная орбиталь, спин-орбиталь).
24. Связь электронной задачи с пространственной симметрией, угловым моментом и спином.
25. Понятие об угловом моменте. Основные соотношения и операторы квантовой теории углового момента.
26. Спин электрона. Спиновые операторы и функции.
27. Сложение угловых моментов. Сложение электронных спинов.
28. Многоэлектронные волновые функции. Принцип Паули. Фермионы и бозоны. Детерминант Слэйттера. Следствие принципа Паули "принцип запрета".
29. Многоэлектронные волновые функции. Спиновые и пространственные свойства волновой функции. Набор операторов и квантовых чисел, определяющих симметрию многоэлектронных волновых функций в атомах и молекулах.
30. Оболочка (в атомах и молекулах). Вместимость и число заполнения. Замкнутые и открытые оболочки. Электронная конфигурация. Примеры часто встречающихся электронных конфигураций.
31. Микросостояния. Функции правильной симметрии. Термы. Обозначения в атомах и молекулах.
32. Термы, порождаемые заданной электронной конфигурацией в атомах и молекулах. Нахождение набора возможных термов (на примере атомной конфигурации  $p^2$ ). Правило Гунда (первая и вторая части).
33. (Вопрос на проверку владения терминологией и важнейшими понятиями). Дать определение (коротко пояснить): многоэлектронная волновая функция – одноэлектронная волновая функция; орбиталь (атомная, молекулярная); пространственная орбиталь – спин-орбиталь; занятая орбиталь – вакантная орбиталь; каноническая орбиталь – локализованная орбиталь.
34. (Вопрос на проверку владения терминологией и важнейшими понятиями). Дать определение (коротко пояснить): электронная оболочка (замкнутая, открытая); электронная конфигурация; микросостояние; функция правильной симметрии; пространственное и спиновое вырождение электронных состояний; синглетное и триплетное спиновые состояния; эффект Зеемана.
35. Уравнения Хартри-Фока. Схема получения.
36. Физическое содержание приближения Хартри-Фока. Самосогласованное поле (ССП). Полная энергия в приближении Хартри-Фока. Теорема Купменса.
37. Ограниченный и неограниченный по спину методы Хартри-Фока.
38. Метод Рутаана. Уравнения Хартри-Фока-Рутаана: схема получения и основные величины.
39. Системы базисных функций. МО ЛКАО. Слэйтеровские и гауссовы орбитали.

Основные типы гауссовых базисов.

40. Метод полного конфигурационного взаимодействия. Классификация конфигураций. Структура матрицы гамильтониана в методе ПКВ. Значение метода ПКВ в квантовой химии.
41. Электронная корреляция. Недостатки метода Хартри-Фока (одноэлектронного приближения). Энергия электронной корреляции. Общая классификация методов учета эффектов электронной корреляции.
42. Метод конфигурационного взаимодействия (КВ). Различные подходы к формулировке приближенных схем в методе КВ: учет различных классов возбуждений и полное активное пространство Достоинства и недостатки схем на основе метода КВ.
43. Метод связанных кластеров. Кластерное разложение. Приближенные схемы. Достоинства и недостатки схем на основе метода связанных кластеров.
44. Теория возмущений для учета энергии корреляции. Разбиение гамильтониана по Мёллеру-Плессету. Условия сходимости ряда теории возмущений Мёллера-Плессета. Достоинства и недостатки приближенных схем в методе теории возмущений Мёллера-Плессета.
45. Метод МКССП. Достоинства и недостатки метода МКССП.
46. Комбинированные (многоуровневые) методы квантовой химии типа QM/MM. Современный подход к изучению сложных биологических систем.

### ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ

Индикаторы достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть)	Процедура оценивания
ОПК-1.2 Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук	<b>Знать:</b> теоретические основы физической и квантовой химии и способы их использования при решении конкретных химических задач. <b>Уметь:</b> проводить первичный анализ результатов с учетом общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин; сопоставлять химическую информацию из разных источников, обобщать литературные данные и результаты собственных работ; грамотно формулировать выводы. <b>Владеть:</b> навыками критического анализа химической литературы.	Выполнение практических работ по решению задач. Отчеты по решению задач. Собеседование в форме коллоквиума. КР
ОПК-1.3 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	<b>Знать:</b> теоретические основы физической и квантовой химии и способы их использования при решении конкретных химических задач.	Выполнение практических работ по решению задач. Отчеты по решению задач. Собеседование в форме коллоквиума.

	<p><b>Уметь:</b> проводить первичный анализ результатов с учетом общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин;</p> <p>сопоставлять химическую информацию из разных источников, обобщать литературные данные и результаты собственных работ;</p> <p>грамотно формулировать выводы.</p> <p><b>Владеть:</b> навыками критического анализа химической литературы.</p>	КР
<p>ОПК-3.2</p> <p>Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p><b>Знать:</b> возможности и границы применимости химических теорий; требования к результатам теоретических расчетов; способы практического использования результатов теоретических расчетов.</p> <p><b>Уметь:</b> пользоваться современным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов.</p> <p><b>Владеть:</b> расчетно-теоретическими методами изучения свойств веществ и процессов с их участием.</p>	<p>Выполнение практических работ по решению задач. Отчеты по решению задач. Собеседование в форме коллоквиума.</p> <p>КР</p>

**Программа оценивания контролируемых компетенций:**

Тема или раздел дисциплины <sup>1</sup>	Код индикатора компетенции	Планируемый результат	Показатель	Критерий оценивания	Наименование ОС <sup>2</sup>	
					ТК <sup>3</sup>	ПА <sup>4</sup>
2. Математический формализм квантовой химии	<b>ИДК</b> опк-1.3 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.	<b>Знать:</b> Математический формализм квантовой химии. <b>Уметь:</b> им пользоваться.	<b>Знает:</b> Математический формализм квантовой химии (дираковские обозначения, элементы линейной алгебры и матанализа). <b>Умеет</b> читать литературу, писать формулы и выполнять их преобразования.	Владеет материалом, представленным в разделе 2 и вопросах для собеседования для коллоквиума 1 (№ 9-15) и коллоквиума 2.  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.	УО, Кл, К, ПЗ	<b>Экзамен</b>
3. Уравнение Шредингера для молекул	<b>ИДК</b> опк-1.3 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.	<b>Знать:</b> Вид оператора энергии для молекул, смысл всех членов и учитываемых взаимодействий <b>Уметь:</b> составлять оператор энергии для любой молекулярной и атомной системы.	<b>Знает:</b> Теорию уравнение Шредингера для молекул. <b>Умеет</b> применять ее на практике.	Владеет материалом, представленным в разделе 3 и вопросах для собеседования для коллоквиума 3 (№ 1-9).  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.		

4. Адиабатическое приближение	<b>ИДЖ</b> Опк-1.3 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.	<b>Знать:</b> Понятие адиабатического приближения, его обоснование и границы применимости. <b>Уметь:</b> объяснить суть адиабатического приближения, распознавать ситуации, когда возможно его нарушение.	<b>Знает</b> теоретические основы приближенного разделения электронной и ядерной задач. <b>Умеет</b> применять формализм и критерии оценки корректности адиабатического приближения на практике.	Владеет материалом, представленным в разделе 4 и вопросах для собеседования для коллоквиума 3 (№ 10-19).  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.		
5. Поверхность потенциальной энергии	ОПК-3.2 Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	<b>Знать:</b> Понятие поверхности потенциальной энергии (ППЭ). <b>Уметь:</b> объяснить суть понятия ППЭ, анализировать точки на ППЭ, визуализировать сечения ППЭ.	<b>Знает</b> теоретические основы и рассуждения, приводящие к понятию ППЭ; определение ППЭ и области ее применимости в химии. <b>Умеет</b> применять теорию для оптимизации геометрии и поиска переходных состояний, интерпретации результатов молекулярной спектроскопии и фотохимии.	Владеет материалом, представленным в разделе 5 и вопросах для собеседования для коллоквиума 4 (№ 20-28).  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.		
6. Ядерная динамика и решение колебательной задачи	ОПК-3.2 Использует стандартные и	<b>Знать:</b> Физические основы подхода к рассмотрению	<b>Знает</b> теоретические основы подхода к рассмотрению ядерной	Владеет материалом, представленным в разделе 6 и вопросах		

для ядер	оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	ядерной динамики с использованием адиабатического и гармонического приближений. <b>Уметь:</b> учитывать ядерную динамику при проведении квантово-химических расчетов, интерпретировать полученные результаты.	задачи. <b>Умеет</b> применять теорию на практике для расчета колебательных спектров и интерпретации спектроскопических данных.	для собеседования для коллоквиума 4.  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.		
7. Электронное уравнение Шредингера	ОПК-1.3 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	<b>Знать:</b> Физический смысл членов в электронном гамильтониане и основные проблемы решения многоэлектронной задачи; понятие одноэлектронного приближения. <b>Уметь:</b> Записывать электронный гамильтониан в точном виде и одноэлектронном приближении; ориентироваться в	<b>Знает</b> теоретические основы подхода к рассмотрению электронной задачи. <b>Умеет</b> представлять многоэлектронную функцию в виде разложения по конфигурационным функциям; составлять конфигурационные функции из одноэлектронных.	Владеет материалом, представленным в разделе 7 и вопросах для собеседования для коллоквиума 5 (№ 1-7).  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.		

		представлении одноэлектронных и многоэлектронных волновых функций.			
8. Спин	<b>ИДЖ</b> опк-1.3 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.	<b>Знать:</b> Физический смысл спина и основы математического формализма для его описания. <b>Уметь:</b> Записывать спиновые функции для систем электронов, определять полный спин и его проекции.	<b>Знает</b> основные физические и теоретические сведения, относящиеся к спиновым свойствам электронных систем. <b>Умеет</b> применять формализм описания спина для интерпретации экспериментальных данных и результатов квантовохимических расчетов.	Владеет материалом, представленным в разделе 8 и вопросах для собеседования для коллоквиума 5 (№ 9-14).  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.	
9. Многоэлектронная волновая функция и ее свойства. Электронные состояния	<b>ОПК-3.2</b> Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	<b>Знать:</b> Физический смысл многоэлектронной волновой функции и ее основные симметричные свойства. Принципы построения функций правильной симметрии. <b>Уметь:</b> Предсказывать	<b>Знает</b> основные физические и теоретические сведения, относящиеся к волновым функциям правильной симметрии и молекулярным термам. <b>Умеет</b> применять формализм для интерпретации экспериментальных данных и проведения	Владеет материалом, представленным в разделе 9 и вопросах для собеседования для коллоквиумов 6 и 7.  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.	



		количество и тип термов, возможных в той или иной электронной конфигурации.	расчетов.			
10. Метод Хартри-Фока	ОПК-1.3 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	<b>Знать:</b> Теорию метода Хартри-Фока. <b>Уметь:</b> выводить уравнения Хартри-Фока.	<b>Знает</b> теорию метода Хартри-Фока, свойства лежащего в основе одноэлектронного приближения. <b>Умеет</b> проводить расчеты методом Хартри-Фока и интерпретировать полученные результаты.	Владеет материалом, представленным в разделе 10 и вопросах для собеседования для коллоквиума 8.  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.		
11. Подход МО ЛКАО и метод Рутаана	ОПК-1.3 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	<b>Знать:</b> физические и математические основы приближения МО ЛКАО. <b>Уметь:</b> объяснить суть приближения МО ЛКАО и применять его на качественном уровне.	<b>Знает</b> приближение МО ЛКАО и связанные с ним концепции и понятия квантовой химии; метод Рутана; основные типы базисных наборов. <b>Умеет</b> применять теорию МО ЛКАО для проведения расчетов и интерпретации полученных результатов; правильно выбирать базисные	Владеет материалом, представленным в разделе 11 и вопросах для собеседования для коллоквиума 9 (№ 1-9).  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.		

			наборы.			
12. Обзор методов учета электронной корреляции	ОПК-1.3 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	<b>Знать:</b> Понятие электронной корреляции и основные подходы, применяемые для ее учета. <b>Уметь:</b> анализировать методы учета электронной корреляции с точки зрения классов учитываемых конфигураций и подходов, лежащих в их основе.	<b>Знает</b> теоретические основы методов учета электронной корреляции, основные методы учета электронной корреляции, из преимущества и недостатки. <b>Умеет</b> выбирать адекватный метод учета электронной корреляции, ориентироваться в основных расчетных схемах.	Владеет материалом, представленным в разделе 12 и вопросах для собеседования для коллоквиума 9 (№ 10-16).  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.		
13. Метод DFT и обзор полуэмпирических методов расчета	ОПК-1.3 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	<b>Знать:</b> основы теории DFT и вывод уравнений Кона-Шема. <b>Уметь:</b> объяснить основные понятия, связанные с теорией метода DFT.	<b>Знает</b> теоретические основы метода DFT, основные функционалы, применяемые на практике, из преимущества и недостатки. <b>Умеет</b> проводить расчеты методом DFT, ориентироваться в используемых функционалах.	Владеет материалом, представленным в разделе 13 и вопросах для собеседования для коллоквиума 9 (№ 17-19).  Решил 2/3 задач ПЗ. Получил за контрольную работу "удовлетворительно" и выше.		

УО – устный опрос, Кл – коллоквиум, О – отчет по лабораторной работе, К – контрольная работа, Т – тест, ПЗ – практическое задание.

## **КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ:**

1. Студенту необходимо решить 3 блока из 10 задач (всего 30 задач). По каждому блоку предоставляется отчет. Каждая работа оценивается максимум на 5 баллов. Оценивается правильность решения, а также качество оформления отчетов (логика, техника расчетов, представление графического материала и выводы).
2. Предусмотрено 9 собеседований по теоретическому материалу в виде коллоквиумов. Каждая тема оценивается максимум на 5 баллов.
3. Предусмотрено 6 контрольных работ, каждая из которых оценивается максимум на 5 баллов.
4. Максимальное количество баллов на экзамене 25.

### **Оценка «отлично»:**

сформированные и систематизированные знания предмета, сформированные умения и навыки применения методов и подходов изучаемой дисциплины при решении учебных и практических задач (215-250 баллов).

### **Оценка «хорошо»:**

в целом, сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания предмета, умение применять методы и подходы изучаемой дисциплины при решении учебных и практических задач с минимальным количеством ошибок не принципиального характера, наличие навыков применения методов и подходов изучаемой дисциплины при решении учебных и практических задач (175 - 214 баллов).

### **Оценка «удовлетворительно»:**

несистематизированные знания предмета, частично сформированные умения и навыки применения методов и подходов изучаемой дисциплины при решении учебных задач (125-174 баллов).

### **Оценка «неудовлетворительно»:**

фрагментарное знание предмета, отсутствие умений и навыков применения методов и подходов изучаемой дисциплины при решении учебных задач (менее 124 баллов).

### **Разработчики:**



д-р хим. наук

А.Б. Трофимов

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению подготовки 04.04.01 – «Химия».

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии  
«26» апреля 2024 г.

Протокол № 9 И.о. зав. кафедрой



/Л.Б. Белых /

*Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.*