

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет  
Кафедра физической химии

УТВЕРЖДАЮ:

проректор по научной, методической  
и учебной работе

« 22 » апреля 2020



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

«КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»

Специальность: 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Образовательная программа: специалитет


Квалификация: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения:  
очная

Донецк 2020


**УТВЕРЖДАЮ:**

Декан химического факультета

  
А.В. Белый« 16 » апреля 2020 г.  


Программа составлена на основе Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 13 июля 2017 г. № 652; учебного плана и основной образовательной программы специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, разработанных в ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет».

Разработчик:

Доцент кафедры физической химии,  
к.х.н., доцент  
Н.А. Туровский

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии

Протокол №13 от «28» марта 2020 г.

Заведующий кафедрой

  
В.М. Михальчук

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией химического факультета

Протокол № 3 от «15» апреля 2020 г.

Председатель учебно-методической  
комиссии факультета  
Н.В. Яблочкова

## 1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

Учебная дисциплина «Квантовая химия» относится к базовой части профессионального блока дисциплин (ПБ.Б.16) подготовки студентов ОП Специалитет по специальности 04.05.01 *Фундаментальная и прикладная химия*. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими и сопутствующими дисциплинами: неорганическая, органическая, физическая химия. Дисциплина «Квантовая химия» реализуется на химическом факультете ДонНУ кафедрой физической химии и является основой для прохождения научной практики и выполнения дипломной работы по специальности 04.05.01 *Фундаментальная и прикладная химия*.

## 2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

| <i>Характеристика учебной дисциплины</i>                         |                                                      |                        |
|------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------|------------------------|
| Специальность                                                    | <b>04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»</b> |                        |
| Специализация                                                    |                                                      |                        |
| Образовательная программа                                        | специалитет                                          |                        |
| Квалификация                                                     | <i>Химик. Преподаватель химии</i>                    |                        |
| Количество содержательных модулей                                | 4                                                    |                        |
| Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы | <i>Профессиональный блок, базовая часть</i>          |                        |
| Формы контроля (МК, экзамен, зачет)                              | МК, экзамен                                          |                        |
| Показатели                                                       | очная форма обучения                                 | заочная форма обучения |
| Количество зачетных единиц (кредитов)                            | 6                                                    |                        |
| Год подготовки                                                   | 3                                                    |                        |
| Семестр                                                          | 5                                                    |                        |
| Количество часов                                                 | 216                                                  |                        |
| - лекционных                                                     | 72                                                   |                        |
| - практических, семинарских                                      | -                                                    |                        |
| - лабораторных                                                   | 36                                                   |                        |
| - самостоятельной работы                                         | 108                                                  |                        |
| в т.ч. индивидуальное задание                                    | -                                                    |                        |
| Недельное количество часов,                                      | 12                                                   |                        |
| в т.ч. аудиторных                                                | 6                                                    |                        |

## 3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Цель:

- *педагогическая* – подготовка специалистов-химиков, которые умеют применять все возможности современной квантовой химии для решения текущих химических проблем;
- *дидактическая* – усвоение знаний, предусмотренных программой, благодаря целенаправленному сотрудничеству преподавателя и студента;
- *методическая* – выделить главное звено в каждой теме, что будет способствовать формированию основных понятий по курсу, формированию знаний в результате активизации познавательной деятельности студентов, применение различных методов активного обучения.

**Задачи:**

1. раскрыть физический смысл основных постулатов, приближений и концепций квантовой химии, научить студента видеть области применения этих приближений и концепций при решении конкретных химических проблем;
2. выделить методологически важные вопросы химии и на конкретных примерах показать взаимосвязь квантовой химии с другими дисциплинами химического и естественно-научного циклов.
3. развитие умений, которые помогут грамотно применять методы квантовой химии при решении различных задач, дать в руки будущим специалистам-экспериментаторам инструмент, который позволил бы проводить квантово-химические исследования с использованием всех возможностей современных компьютерных технологий квантовой химии при решении типичного цикла задач: расчеты геометрических характеристик молекул; построение карт распределения электронной плотности вдоль разных сечений в пространстве молекулы; расчеты дипольных моментов и энергий ионизации молекул; расчеты поверхности потенциальной энергии химических реакций.

**Требования к результатам освоения дисциплины.** Процесс изучения дисциплины «Квантовая химия» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия:

**а) универсальных компетенций (УК):***системное и критическое мышление*

– способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий (УК-1);

*разработка и реализация проектов*

– способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла (УК-2);

*коммуникация*

– способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия (УК-4);

*самоорганизация и саморазвитие (в том числе здоровьесбережение)*

– способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки и образования в течение всей жизни (УК-6).

*безопасность жизнедеятельности*

– способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций (УК-8).

**б) общепрофессиональных компетенций (ОПК):***общепрофессиональные навыки*

– способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетнотеоретических работ химической направленности (ОПК-1);

– способен проводить химический эксперимент с использованием современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности (ОПК-2);

– способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения (ОПК-3).

*физико-математическая и компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности*

– способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач (ОПК-4);

– способен использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-5);

*представление результатов профессиональной деятельности*

– способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе (ОПК-6).

**в) профессиональные компетенции (ПК):**

*научно-исследовательская деятельность:*

– способен проводить сбор, обработку, анализ и обобщение результатов экспериментов и исследований в различных областях химии, химической технологии и смежных наук (ПК-1);  
– способен оформлять результаты научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (ПК-2);  
– способен внедрять результаты исследований и разработок в соответствии с установленными полномочиями (ПК-3).

*технологическая деятельность:*

– способен проводить научные исследования, совершенствовать и разрабатывать теории и методы изучения химических процессов, осуществлять практическое применение полученных знаний и результатов в различных отраслях экономики (промышленности, сельском хозяйстве и др.), связанных с переработкой сырья, полуфабрикатов, промышленных отходов, получением и совершенствованием различных веществ, материалов, разработкой и улучшением технологических процессов (ПК-4);  
– способен к проведению опытов, испытаний и анализов с целью изучения состава, строения, свойств и процессов превращений веществ, энергетических и химических изменений в различных натуральных или искусственных веществах, сырье и изделиях (ПК-5);  
– способен на разработку методик проведения контроля качества для изготовителей и потребителей химической продукции (ПК-6).

*организационно-управленческая деятельность:*

– способен осуществлять научное руководство работами в соответствии с планом работы структурного подразделения, формировать их конечные цели и предполагаемые результаты (ПК-7);  
– способен осуществлять контроль выполнения предусмотренных планом заданий, контроль качества проведения работ, выполненных работниками подразделения и соисполнителями (ПК-8);  
– способен применять актуальную нормативную документацию в соответствующей области знаний (ПК-9).

*педагогическая деятельность:*

– способен осуществлять профессиональную деятельность в соответствии с требованиями федеральных государственных образовательных стандартов, к разработке, изменению и обеспечению выполнения учебных программ в соответствии с учебным планом и графиком учебного процесса (ПК-10);  
– способен использовать разнообразные эффективные формы, приемы и методы обучения, в том числе, выходящие за рамки учебных занятий: проектная деятельность, лабораторные эксперименты, полевая практика и т.п., к проведению индивидуальных занятий с обучающимися, организацию и контроль их самостоятельной работы (ПК-11);  
– способен разрабатывать (осваивать) и применять современные психолого-педагогические технологии, основанные на знании законов развития личности и поведения в реальной и виртуальной среде (ПК-12).

**В результате изучения учебной дисциплины студент должен**

**знать:**

– основные постулаты и приближения квантовой химии;  
– теоретические основы квантово-химических методов исследования электронного строения химических частиц;

- возможности и ограничения методов квантовой химии при определении параметров электронного строения химических частиц;
- концептуальные основы теории химической связи.

**уметь:**

- выбрать квантово-химический метод, для решения поставленной (типичной) задачи;
- выполнить расчет геометрических характеристик химических частиц;
- определить и обосновать распределение электронной плотности на атомах химических частиц;
- построить карты распределения электронной плотности на атомах химической частицы, провести анализ химических связей;
- определить энергии ионизации молекулярных систем;
- исследовать поверхность молекулярного электростатического потенциала химических частиц;
- определить теплоты химических реакций;
- получить квантово-химические данные для исследования поверхности и пути химической реакции;
- выполнить квантово-химические расчеты стереохимического строения и физико-химических свойств простейших молекул используя современные компьютерные технологии квантовой химии;
- интерпретировать и использовать результаты квантово-химических расчетов;
- ориентироваться в круге основных проблем современной квантовой химии.

**владеть:**

- навыками применения основных положений квантовой химии для анализа свойств химических соединений;
- методологией квантово-химического определения прочности химической связи;
- методологией квантово-химического определения параметров электронодонорных и электроноакцепторных свойств химических соединений;
- методологией квантово-химического определения дипольных моментов химических соединений;
- методологией квантово-химического определения энергии электронных переходов из основного в возбужденное электронное состояние химических соединений;
- методологией квантово-химического прогноза направления протекания химической реакции;
- методологией анализа результатов молекулярного моделирования методами квантовой химии;
- методологией расчета квантово-химических индексов реакционной способности химических частиц вещества;
- методологией квантово-химической оценки кинетических и активационных параметров химической реакций.

#### 4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ И ФОРМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

| Порядковый номер и наименование темы                                                            | Краткое содержание темы                                                                                                                    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <i>Содержательный модуль 1. Несколько шагов в мир информационных технологий квантовой химии</i> |                                                                                                                                            |
| <b>Тема 1.</b><br>Современные информационные технологии квантовой химии.                        | Комплекс программ структурной химии HyperChem. Запуск и завершение работы HyperChem. Структура рабочего окна и меню HyperChem. Возможности |



|                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
|-------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                     | HyperChem в создании молекулярной модели.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| <b>Тема 2.</b><br>Создание и редактирование HyperChem модели химических соединений. | Построение отдельных атомов, связей. Создание 2D-эскиза молекулярной модели. Редактирование 2D-эскиза молекулярной модели. Преобразование 2D-эскиза модели в 3D-структурную модель. Сохранение молекулярной модели. Выделение структурных элементов в молекулярной модели. Определение величин параметров молекулярной структуры. Редактирование параметров молекулярной структуры. Визуализация молекулярной модели. Изменение цвета рабочего окна и молекулярных объектов. Графическое представление молекулярной модели.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| <b>Тема 3.</b><br>Методология Hyper Chem квантово-химического расчета.              | Выбор приближения квантово-химического расчета. Выбор метода и параметров квантово-химического расчета. Выбор режима квантово-химического расчета. Сохранение результатов квантово-химического расчета. Структура типичного log – файла. Типичная структура Z – матрицы химической частицы. Вывод результатов расчета на экран монитора. Графическое представление молекулярных орбиталей.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| <b>Содержательный модуль 2. Становление и развитие квантовой химии.</b>             |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| <b>Тема 4.</b><br>Экспериментальные основы квантовой теории частиц микромира.       | Механика объектов макро- и микромира. Квантование энергии объектов микромира. Постулат и уравнение Планка. Квантование энергии электронов в атомах. Постулат и уравнения Эйнштейна. Эволюция представлений о строении атомов: орбитальная модель атома, постулаты Бора. Волновая природа электронов. Постулаты и уравнения де Бройля. <a href="#">Принцип неопределённости Гейзенберга</a> . Движение или состояние объектов микромира. Постулат Борна                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>Тема 5.</b><br>Элементы математического аппарата и постулаты квантовой механики. | Концептуальные основы квантовой механики химических частиц. Постулат о способе описания состояния объектов микромира. Стационарное состояние химических частиц вещества. Временное и стационарное уравнение Шредингера Математические операторы. Оператор импульса и его действие. Оператор координаты и его действие. Оператор времени и его действие. Линейные операторы. Действие пары операторов на функцию. Коммутирующие операторы. Эрмитовы операторы. Операторное уравнение на собственные значения. Постулат о способе получения уравнений квантовой механики. Одномерный оператор кинетической энергии микрочастицы. Трёхмерный оператор кинетической энергии объектов микромира. Оператор потенциальной энергии взаимодействия объектов микромира. Оператор полной энергии объектов микромира. Постулат о среднем значении оператора Гамильтона стационарного уравнения Шредингера. Постулат о суперпозиции состояний объектов микромира. Постулат об антисимметричных свойствах функции состояния ансамбля объектов микромира. |
| <b>Тема 6.</b>                                                                      | Уравнение Шредингера для атома водорода в декарто-                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |

|                                                                                                                          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Точные и приближенные методы решения квантовомеханических задач                                                          | вой системе координат. Уравнение Шредингера для атома водорода в сферической системе координат. R-, $\Theta$ - и $\Phi$ - уравнения для атома водорода: условия их решения. Атомные орбитали, квантовые числа.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| <b>Тема 7.</b><br>Электронно-ядерная модель химических частиц и уравнения Шредингера для различных вариантов этой модели | Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Модель и волновое уравнение химической частицы в приближении Борна – Оппенгеймера. Модель и волновое уравнение одноатомной химической частицы в одноэлектронном приближении Хартри. Модель химической частицы в приближении самосогласованного поля. Многоэлектронная волновая функция Слейтера. Метод Хартри – Фока. Электронная энергия системы электронов. Орбитальные энергии. Электронная и орбитальные энергии молекул с закрытыми оболочками. Метод Дирака — Фока.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| <b>Содержательный модуль 3.</b>                                                                                          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| <b>Тема 8.</b><br>Концептуальные основы метода молекулярных орбиталей                                                    | Молекулярные орбитали. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей. Молекулярные орбитали как линейные комбинации базисных функций (атомных орбиталей). Вариационная теорема: пробные и точные молекулярные орбитали, базисные функции. Закрытые оболочки. Открытые оболочки. Ограниченный метод Хартри — Фока. Неограниченный метод Хартри — Фока. Теорема Купманса. Валентное приближение квантовой химии. Структура блока МО химической частицы: общее число МО: заполненные электронами и вакантные МО. Граничные МО: ВЗМО и НВМО. Орбитальный потенциал ионизации молекулярной частицы в соответствии с теоремой Купманса. Орбитальное сродство к электрону молекулярной частицы в соответствии с теоремой Купманса. Характеристики распределения электронной плотности в химических частицах. Электронная заселенность атомных орбиталей химических частиц в приближении метода МО. Электронная плотность на атомах химических частиц в приближении метода МО. Заряд на атомах химических частиц в приближении метода МО. Порядок химической связи в приближении метода МО. Энергия химических частиц в приближении метода МО. Энергия диссоциации химической связи. Энергия ионизации химических частиц. |
| <b>Тема 9.</b><br>МО неэмпирической и DFT квантовой химии                                                                | Орбитали Хартри — Фока. Орбитали Слейтера - Зенера. Базисные функции для неэмпирических расчетов. Аналитические базисные функции. Орбитали гауссового типа. Атомные орбитали. Одноэкспоненциальная орбиталь слэтеровского типа. Эффективный заряд ядра и экранирование электронов. Релаксация орбиталей. Базисные функции. Функции слэтеровского типа. Функции гауссова типа. Способы применения гауссовых функций. Классификация базисных наборов. Ми-                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |



|                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                                                 | <p>нимальные базисные наборы. Двухэкспоненциальные базисные наборы. Расширенные базисные наборы. Поляризационные и диффузные функции. Корреляционно-согласованные базисные наборы. Сбалансированность базисных наборов и обеспеченность электронов базисными функциями. Многоуровневые методы. Атомные базисные наборы. Молекулярные базисные наборы Попла. Минимальные базисные наборы STO-kG. Валентно-расщепленные базисные наборы m-npG. Поляризационные функции валентно-расщепленного базисного набора. Диффузные функции валентно-расщепленного базиса. Многоуровневые экситраполяционные наборы Попла. Точность неэмпирических квантовохимических расчетов молекул. Источники погрешности ССП МО ЛКАО расчетов. Состав электронной корреляции. Общий подход к учету энергии электронной корреляции. Эмпирические и гибридные методы структурной химии: молекулярная механика, комбинированные квантово-классические приближения (QM/MM)</p>                                                                                                                                                                                                                                                               |
| <p><b>Тема 10.</b><br/>Методология полуэмпирической квантовой химии</p>                                         | <p>NDDO полуэмпирическая квантовая химия: AM1, RM1. PM3, PM6, PDDG параметризации.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| <p><b>Тема 11.</b><br/>Методология и современные компьютерные технологии квантово-химического моделирования</p> | <p>GAUSSIAN, GAMESS, HyperChem, MOPAC – комплексы программ структурной химии. Их возможности и ограничения. Методика создания и редактирование модели химических соединений. Методика квантово-химического расчета. Анализ результатов квантово-химического расчета. Квантовохимический расчет соединений с открытой оболочкой. Электронно-возбужденное состояние химических частиц. Электронное строение химических соединений. Распределение электронной плотности в химических частицах. Энергия диссоциации химической связи. Энергия ионизации химических частиц. Проблемы осуществления квантово-химического моделирования неадиабатических реакций. Термодинамические свойства. Энергия образования молекул из атомов. Виды энергии молекулы. Расчет термодинамических функций. Анализ заселенностей. Порядок связи. Валентность и ее виды/Компьютерная спектроскопия. GAUSSIAN, GAMESS, MOPAC, HyperChem – колебательная спектроскопия. GAUSSIAN, GAMESS, MOPAC, HyperChem электронная спектроскопия. Приближение виртуальных орбиталей. Приближение конфигурационного взаимодействия. Прямой метод SCF. Интенсивность электронного перехода. Рентгено-, фото- и трансмиссионные электронные спектры.</p> |
| <p><b>Содержательный модуль 4</b></p>                                                                           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| <p><b>Тема 12.</b><br/>Концептуальные основы, состояние и проблемы теории хими-</p>                             | <p>Роль фаз атомных орбиталей при образовании МО. Конструктивная и деструктивная интерференция АО. Связывающие и несвязывающие электронные пары;</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |

|                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>ческой связи.</p>                                                                                            | <p>связывающие и антисвязывающие комбинации АО. Классификация МО по их свойствам симметрии. Основные представления орбитальной картины химической связи. Необходимость условий одинаковой симметрии взаимодействующих АО для образования химической связи. Принцип орбитального соответствия. МО и орбитальное соответствие АО (методика Маллика). Анализ заселенностей орбиталей по Малликену. Представление о зарядах и порядках связи, используемое при орбитальном описании химической связи. Деформационная электронная плотность. Особенности пространственного распределения электронной плотности в ковалентной связи. Особенности пространственного распределения электронной плотности в ионной связи. Параметры критических точек электронной плотности, характеризующие химическую связь. Тип критической точки электронной плотности в межъядерном пространстве химической связи. Лапласиан электронной плотности, характеризующий химическую связь. Знак лапласиана электронной плотности для критической точки электронной плотности ковалентной связи. Знак лапласиана электронной плотности для критической точки электронной плотности ионной связи. Электростатический аспект описания химической связи. Основные принципы локализации орбиталей.</p> |
| <p><b>Тема 13.</b><br/>Квантово-химическое описание реакций: проблемы и методы учета электронной корреляции</p> | <p>Элементарный акт химической реакции. Теория переходного состояния химической реакции. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции. Стационарные точки ППЭ элементарной реакции. Путь химической реакции. Оценка геометрии переходного состояния химической реакции. Индексы реакционной способности. Молекулярный электростатический потенциал. Метод граничных орбиталей. Теория жестких и мягких кислот и оснований. Абсолютная жесткость и абсолютная мягкость молекулярных систем. Квантовая термодинамика. Метод изодесмических реакций. Определение термодинамических характеристик химических частиц и энергии их диссоциации на ионы и радикалы в приближении изодесмических реакций. Неизодесмические реакции. Значение корреляционных эффектов. Типы корреляционных эффектов. Методы учета электронной корреляции. Коррелированные методы. Конфигурационное взаимодействие. Метод теории возмущений. Метод теории связанных кластеров. Многоконфигурационное взаимодействие. Метод конфигурационного взаимодействия нескольких исходных конфигураций. Метод функционала электронной плотности. Основные положения метода. Метод Кона — Шэма. Квантовые методы Монте-Карло.</p>                                                              |
| <p><b>Тема 14.</b><br/>Методология квантово-</p>                                                                | <p>Моделирование сольватных оболочек: квантовохимические модели; супермолекулярное приближение. Кон-</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |

|                                                                                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|--------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>химического моделирования с учетом эффекта сольватации объектов</p>         | <p>тинувальная модель поляризационного действия растворителя COSMO. Квантовохимическая модель COSMO влияния растворителя на энергию и электрона структуру химических объектов. Энергия и градиенты энергии диэлектрического экранирования растворителем молекул вещества. Полная энергия сольватированных молекулярных систем. Возможности и ограничение модели COSMO. Дизайн поверхности поляризационного действия растворителя (ППДР) в приближении COSMO: базисная сетка ППДР и принцип ее построения, сегменты поверхности поляризационного действия растворителя; число узловых точек на базисной сетке поверхности доступа растворителя; радиус межсегментного взаимодействия на ППДР; диэлектрический фактор; ван-дер-ваальсовый радиус молекул растворителя; сольватационный радиус атомов молекулярных систем; эффективный зарядовый радиус молекул растворителя; Методика квантовохимического моделирования действия среды на химические объекты в приближении модели COSMO. Эффекты поляризационного действия растворителя на молекулярную геометрию химических частиц с открытой и закрытой электронной оболочкой. Эффекты поляризационного действия растворителя на параметры электронной структуры химических частиц с открытой и закрытой электронной оболочкой. Эффекты поляризационного действия растворителя на физико-химические параметры молекулярных систем или их комплексов.</p> |
| <p><b>Тема 15.</b><br/>Актуальные направления современной квантовой химии.</p> | <p>Квантовая биохимия. Квантовая медицинская химия. Квантовая экологическая химия, Квантовая химия твердого тела. Квантовая химия супрамолекулярных супрамолекулярных систем. Квантовая нанохимия. Сканирующая зондовая микроскопия как инструмент квантовой химии. Зондовая туннельная микроскопия. Магнитно-силовая микроскопия. Электросиловая микроскопия. Ближнепольная оптическая спектроскопия.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |

| Содержательный модуль 1                                                              |                      |           |              |              |                        |                       |                        |        |              |              |                        |                       |
|--------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|-----------|--------------|--------------|------------------------|-----------------------|------------------------|--------|--------------|--------------|------------------------|-----------------------|
| Названия содержательных модулей и тем                                                | Количество часов     |           |              |              |                        |                       |                        |        |              |              |                        |                       |
|                                                                                      | Очная форма обучения |           |              |              |                        |                       | Заочная форма обучения |        |              |              |                        |                       |
|                                                                                      | всего                | в т.ч.    |              |              |                        |                       | всего                  | в т.ч. |              |              |                        |                       |
|                                                                                      |                      | лекции    | практические | лабораторные | самостоятельная работа | индивидуальная работа |                        | лекции | практические | лабораторные | самостоятельная работа | индивидуальная работа |
| <b>Тема 1.</b><br>Современные информационные технологии квантовой химии.             | 14                   | 2         |              | 2            | 10                     |                       |                        |        |              |              |                        |                       |
| <b>Тема 2.</b><br>Создание и редактирование Hyper Chem модели химических соединений. | 16                   | 2         |              | 4            | 10                     |                       |                        |        |              |              |                        |                       |
| <b>Тема 3.</b><br>Методология Hyper Chem квантово-химического расчета.               | 24                   | 8         |              | 6            | 10                     |                       |                        |        |              |              |                        |                       |
| <b>Итого по содержательному модулю 1</b>                                             | <b>54</b>            | <b>12</b> | <b>-</b>     | <b>12</b>    | <b>30</b>              |                       |                        |        |              |              |                        |                       |

|                                                                                     | Содержательный модуль 2 |              |              |                        |                       |        |                                                            |              |              |                        |                       |  |
|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|--------------|--------------|------------------------|-----------------------|--------|------------------------------------------------------------|--------------|--------------|------------------------|-----------------------|--|
| Названия содержательных модулей и тем                                               | Количество часов        |              |              |                        |                       |        |                                                            |              |              |                        |                       |  |
|                                                                                     | Очная форма обучения    |              |              |                        |                       |        | Заочная форма обучения на базе общего среднего образования |              |              |                        |                       |  |
|                                                                                     |                         |              |              |                        |                       |        | в т.ч.                                                     |              |              |                        |                       |  |
|                                                                                     | всего                   | в т.ч.       |              |                        |                       |        | всего                                                      | в т.ч.       |              |                        |                       |  |
| лекции                                                                              |                         | практические | лабораторные | самостоятельная работа | индивидуальная работа | лекции |                                                            | практические | лабораторные | самостоятельная работа | индивидуальная работа |  |
| <b>Тема 4.</b><br>Экспериментальные основы квантовой теории частиц микромира.       | 13                      | 6            |              |                        | 7                     |        |                                                            |              |              |                        |                       |  |
| <b>Тема 5.</b><br>Элементы математического аппарата и постулаты квантовой механики. | 11                      | 4            |              |                        | 7                     |        |                                                            |              |              |                        |                       |  |
| <b>Тема 6.</b><br>Точные и приближенные методы решения квантово-                    | 16                      | 8            |              |                        | 8                     |        |                                                            |              |              |                        |                       |  |

|                                                                                                                                        |           |           |          |          |           |  |  |  |  |  |  |  |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|-----------|----------|----------|-----------|--|--|--|--|--|--|--|
| механических задачах за-<br>дач                                                                                                        |           |           |          |          |           |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>Тема 7.</b><br>Электронно-ядерная мо-<br>дель химических частиц и<br>уравнения Шредингера для<br>различных вариантов этой<br>модели | 14        | 6         |          |          | 8         |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>Итого по содержатель-<br/>ному модулю 2</b>                                                                                         | <b>54</b> | <b>24</b> | <b>-</b> | <b>-</b> | <b>30</b> |  |  |  |  |  |  |  |

|                                                                                                  | Содержательный модуль 3 |        |              |              |                        |                       |                        |        |              |              |                        |                       |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|--------|--------------|--------------|------------------------|-----------------------|------------------------|--------|--------------|--------------|------------------------|-----------------------|
| Названия содержательных модулей и тем                                                            | Количество часов        |        |              |              |                        |                       |                        |        |              |              |                        |                       |
|                                                                                                  | Очная форма обучения    |        |              |              |                        |                       | Заочная форма обучения |        |              |              |                        |                       |
|                                                                                                  | всего                   | в т.ч. |              |              |                        |                       | всего                  | в т.ч. |              |              |                        |                       |
|                                                                                                  |                         | лекции | практические | лабораторные | самостоятельная работа | индивидуальная работа |                        | лекции | практические | лабораторные | самостоятельная работа | индивидуальная работа |
| Тема 8.<br>Концептуальные основы метода молекулярных орбиталей                                   | 14                      | 4      |              | 2            | 8                      |                       |                        |        |              |              |                        |                       |
| Тема 9.<br>МО неэмпирической и DFT квантовой химии                                               | 14                      | 4      |              | 2            | 8                      |                       |                        |        |              |              |                        |                       |
| Тема 10. Методология полуэмпирической квантовой химии                                            | 11                      | 2      |              | 2            | 7                      |                       |                        |        |              |              |                        |                       |
| Тема 11.<br>Методология и современные компьютерные технологии квантово-химического моделирования | 15                      | 6      |              | 2            | 7                      |                       |                        |        |              |              |                        |                       |
| Итого по содержательному модулю 3                                                                | 54                      | 16     | -            | 8            | 30                     | -                     |                        |        |              |              |                        |                       |

|                         | Содержательный модуль 4 |
|-------------------------|-------------------------|
| Названия содержательных | Количество часов        |

| модулей и тем                                                                                           | Очная форма обучения |           |              |              |                        |                | Заочная форма обучения |        |              |              |                        |                       |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|-----------|--------------|--------------|------------------------|----------------|------------------------|--------|--------------|--------------|------------------------|-----------------------|
|                                                                                                         | всего                | в т.ч.    |              |              |                        |                | всего                  | в т.ч. |              |              |                        |                       |
|                                                                                                         |                      | лекции    | практические | лабораторные | самостоятельная работа | индивидуальная |                        | лекции | практические | лабораторные | самостоятельная работа | индивидуальная работа |
| <b>Тема 12.</b><br>Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи                  | 14                   | 6         |              | 4            | 4                      |                |                        |        |              |              |                        |                       |
| <b>Тема 13.</b><br>Квантово-химическое описание реакций: проблемы и методы учета электронной корреляции | 14                   | 6         |              | 4            | 4                      |                |                        |        |              |              |                        |                       |
| <b>Тема 14.</b><br>Методология квантовохимического моделирования с учетом эффекта сольватации объектов  | 13                   | 4         |              | 4            | 5                      |                |                        |        |              |              |                        |                       |
| <b>Тема 15.</b><br>Актуальные направления современной квантовой химии.                                  | 13                   | 4         |              | 4            | 5                      |                |                        |        |              |              |                        |                       |
| <b>Итого по содержательному модулю 4</b>                                                                | <b>54</b>            | <b>20</b> | <b>-</b>     | <b>16</b>    | <b>18</b>              |                |                        |        |              |              |                        |                       |

## 5. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЛЕКЦИОННЫХ, ПРАКТИЧЕСКИХ И ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

### Темы лекционных занятий

| №<br>п/п | Название темы                                                                                          | Количество часов |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|
| 1        | Современные информационные технологии квантовой химии.                                                 | 2                |
| 2        | Создание и редактирование HyperChem модели химических соединений.                                      | 2                |
| 3        | Методология Hyper Chem квантово-химического расчета.                                                   | 8                |
| 4        | Экспериментальные основы квантовой теории частиц микромира.                                            | 6                |
| 5        | Элементы математического аппарата и постулаты квантовой механики.                                      | 4                |
| 6        | Точные и приближенные методы решения квантовомеханических задач                                        | 8                |
| 7        | Электронно-ядерная модель химических частиц и уравнения Шредингера для различных вариантов этой модели | 6                |



|    |                                                                                      |           |
|----|--------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 8  | Концептуальные основы метода молекулярных орбиталей                                  | 4         |
| 9  | МО неэмпирической и DFT квантовой химии                                              | 4         |
| 10 | Методология полуэмпирической квантовой химии                                         | 2         |
| 11 | Методология и современные компьютерные технологии квантово-химического моделирования | 6         |
| 12 | Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи                  | 6         |
| 13 | Квантово-химическое описание реакций: проблемы и методы учета электронной корреляции | 6         |
| 14 | Методология квантовохимического моделирования с учетом эффекта сольватации объектов  | 4         |
| 15 | Актуальные направления современной квантовой химии.                                  | 4         |
|    | <b>ВСЕГО</b>                                                                         | <b>72</b> |

### Темы лабораторных занятий

| №<br>п/п | Название темы                                                                                                              | Количество<br>часов |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|
| 1.       | Методология HyperChem молекулярного моделирования                                                                          | 4                   |
| 2.       | Методология определения <a href="#">параметров</a> статической и динамической молекулярной структуры химических соединений | 4                   |
| 3.       | Квантовохимический расчет в режиме координат внутреннего обращения                                                         | 4                   |
| 4.       | Методология определения энтропии химических соединений                                                                     | 4                   |
| 5.       | Методология конформационного анализа химических соединений                                                                 | 4                   |
| 6.       | Методология определения дипольных моментов молекулярных систем                                                             | 4                   |
| 7.       | Методология определения энергии ионизации химических соединений                                                            | 4                   |
| 8.       | Методология определения сродства к электрону химических соединений                                                         | 2                   |
| 9.       | Методология определения энергии диссоциации химических соединений                                                          | 4                   |
| 10.      | Методология HyperChem молекулярного моделирования                                                                          | 4                   |
|          | <b>ВСЕГО</b>                                                                                                               | <b>36</b>           |

## 6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

### Организация самостоятельной работы студентов

| №<br>п/п | Название темы                                                     | Количество<br>часов |
|----------|-------------------------------------------------------------------|---------------------|
| 1        | Современные информационные технологии квантовой химии.            | 10                  |
| 2        | Создание и редактирование HyperChem модели химических соединений. | 10                  |
| 3        | Методология Hyper Chem квантово-химического расчета.              | 10                  |
| 4        | Экспериментальные основы квантовой теории частиц микромира.       | 7                   |

|    |                                                                                                        |            |
|----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 5  | Элементы математического аппарата и постулаты квантовой механики.                                      | 7          |
| 6  | Точные и приближенные методы решения квантовомеханических задач                                        | 8          |
| 7  | Электронно-ядерная модель химических частиц и уравнения Шредингера для различных вариантов этой модели | 8          |
| 8  | Концептуальные основы метода молекулярных орбиталей                                                    | 8          |
| 9  | МО неэмпирической и DFT квантовой химии                                                                | 8          |
| 10 | Методология полуэмпирической квантовой химии                                                           | 7          |
| 11 | Методология и современные компьютерные технологии квантово-химического моделирования                   | 7          |
| 12 | Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи                                    | 4          |
| 13 | Квантово-химическое описание реакций: проблемы и методы учета электронной корреляции                   | 4          |
| 14 | Методология квантовохимического моделирования с учетом эффекта сольватации объектов                    | 5          |
| 15 | Актуальные направления современной квантовой химии.                                                    | 5          |
|    | <b>ВСЕГО</b>                                                                                           | <b>108</b> |

## 7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

(не предусмотрены программой)

## 8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ К ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

1.

1. Концепция Планка о квантовании энергии в процессах ее поглощения или эмиссии. Как Планк получил фундаментальную константу  $h$ ? Как связаны между собой постоянная Планка  $h$  и редуцированная постоянная Планка (или постоянная Дирака)  $\hbar$ ?
2. Концепция Эйнштейна о квантовании энергии электронов в атомах. Уравнения Эйнштейна для фотоэффекта и энергии фотона.
3. Концепция Бора орбитальной модели атома: силовой постулат стационарности электронной орбиты; правило квантования момента импульса электрона; правило частот. Показать ограниченность силового постулата стационарности электронной орбиты. Показать в приближении правила квантования момента импульса электрона дискретность значений радиуса и энергии электронной орбиты. Показать действие правила частот Бора.
4. Концепция де Бройля о волновой природе электронов. Уравнения де Бройля: уравнение электронной волны де Бройля; уравнение энергии электрона в движении; уравнение момента импульса электрона в движении; уравнение длины волны электрона в движении; уравнение длины волны электрона как функции его кинетической энергии. Обосновать взаимосвязь волнового постулата де Бройля с постулатом Бора о квантовании момента импульса электрона.
5. Концепция Борна о необходимости описания состояния, а не движения, объектов микромира. Как описать состояние объектов микромира? Как определить вероятность местонахождения объектов микромира? Чем отличается комплексно-сопряженная функция состояния объектов микромира  $\Psi^*(x, y, z, t)$  от функции состояния  $\Psi(x, y, z, t)$ ?
6. Постулат о способе описания состояния объектов микромира. Свойства, которыми должна обладать функция состояния объектов микромира. Условие нормировки функции состояния.

7. Концепция стационарного состояния химических частиц вещества.
8. Концепция Шредингера о способе определения функции состояния химических частиц в электронно-ядерном приближении. Получить стационарное уравнение Шредингера.
9. Какой вид имеет оператор импульса? Порядок его действия на функцию.
10. Операторы координаты и времени и порядок их действия на функцию.
11. Какими свойствами должны обладать линейные операторы?
12. Какова последовательность действия пары операторов на функцию.
13. Какими свойствами должны обладать коммутирующие операторы?
14. Какими свойствами должны обладать эрмитовы операторы.
15. Какой вид имеет операторное уравнение на собственные значения?
16. Раскрыть сущность постулата о способе получения уравнений квантовой механики.
17. Получить операторы кинетической энергии для ядерно-электронной модели одноатомной химической частицы.
18. Получить операторы потенциальной энергии для ядерно-электронной модели многоатомной химической частицы.
19. Можно ли полную энергию химической частицы вычислить по схеме:  $E_{\text{полная}} = E_{\text{кинетическая}} + E_{\text{потенциальная}}$ . Обосновать принцип вычисления полной энергии ядерно-электронной модели многоатомной химической частицы используя стационарное уравнение Шредингера.
20. Каким образом можно получить среднее значение оператора Гамильтона уравнения Шредингера для стационарного состояния химических частиц. Физический смысл полученной величины.
21. Модель, волновое уравнение и энергия атома в приближении согласованного движения ядра и электронов.
22. Модель, волновое уравнение и энергия многоатомной химической частицы в приближении согласованного движения ядер и электронов.
23. Модель, волновое уравнение и энергия химической частицы в приближении Борна - Оппергеймера.
24. Модель, волновое уравнение и энергия атома в одноэлектронном приближении Хартри.
25. Структура и свойства многоэлектронной волновой функции (детерминанта) Слэтера.
26. Модель, волновое уравнение и энергия атома в приближении самосогласованного поля Хартри.
27. Модель, волновое уравнение и энергия многоатомных химических частиц в приближении самосогласованного поля Хартри – Фока.
28. Концепция МО в квантовой химии: содержание понятия АО в формулировке Малликена; содержание понятия МО в формулировке Малликена; структура АО – радиальная и сферические функции; квантовые числа – главное, орбитальное и магнитное; требования к МО; постулат о суперпозиции волновых функций; принцип построения МО - вариационная теорема; пробные и точные молекулярные орбитали, приближение МО ЛКАО; базисные функции.
29. RHF приближение квантовой химии.
30. UHF приближение квантовой химии.
31. Неэмпирическая квантовая химия.
32. Полуэмпирическая квантовая химия.
33. Валентное приближение квантовой химии: валентные и невалентные электроны; ядерно-электронный остов.
34. Структура блока МО химической частицы: общее число МО; принцип заполнения МО электронами в UHF и RHF приближении квантовой химии; число заполненных электронами и вакантных МО; граничные МО; ВЗМО и НВМО.

35. Квантово-химическая информативность блока МО химической частицы; Характеристики донорно-акцепторных свойств – энергия ИЗМО и НВМО; орбитальный потенциал ионизации и орбитальное сродство к электрону молекулярной частицы в соответствии с теоремой Купманса; распределение электронной плотности в химических частицах; заряд на атомах химических частиц в приближении метода МО; электронная плотность на атомах химических частиц в приближении метода МО; электронная заселенность атомных орбиталей химических частиц в приближении метода МО; порядок химической связи в приближении метода МО.
36. Возбужденное синглетное электронное состояние химических частиц вещества и его спиновая мультиплетность.
37. Триплетное электронное состояние химических частиц вещества и его спиновая мультиплетность.
38. Образование и дезактивация электронно-возбужденного состояния химических частиц: диаграмма Яблонского.
39. Безизлучательные электронные переходы: внутренняя и интеркомбинационная электронная конверсия.
40. Излучательные электронные переходы; флуоресценция и фосфоресценция.
41. Спиновая мультиплетность ионов: катионов и анионов химических частиц.
42. Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: радикалов, катионов-радикалов и анион-радикалов.
43. Основное синглетное электронное состояние химических частиц вещества и его спиновая мультиплетность.
44. Энергия химических соединений – источник информации о их строении и свойствах: критерии равновесного состояния; критерий процесса самосогласования МО; энергия ионной или радикальной диссоциации химических соединений; энергия вертикальной и адиабатической ионизации химических соединений - потенциал ионизации и сродство к электрону; энергетика электронных переходов – внутренней конверсии, интеркомбинационной конверсии, флуоресценции и фосфоресценции; энергия активации химических реакций.
45. Методология самосогласования МО в процессе квантовохимического расчета.
46. Методология квантово-химического определения энергии гомолитической и гетеролитической диссоциации химических соединений.
47. Какие структурные изменения происходят в химической частице в процессе ее вертикальной ионизации? Методология процесса квантово-химического определения вертикальных потенциалов ионизации и сродства к электрону химических соединений.
48. Какие структурные изменения происходят в химической частице в процессе ее адиабатической ионизации? Методология процесса квантово-химического определения потенциалов ионизации и сродства к электрону химических соединений путем их адиабатической ионизации.
49. Методология квантово-химического определения орбитального потенциала ионизации и орбитального сродства к электрону химических соединений в соответствии с теоремой Купманса.
50. Методология квантово-химического определения энергии электронных переходов процесса: внутренней и интеркомбинационной конверсии, флуоресценции и фосфоресценции.
51. Методология квантово-химического определения энергии активации химических реакций.
52. Классическая структурная теория химической связи: концепция электрохимического дуализма; концепция валентности; ионная концепция; концепция электронных пар.
53. Квантово-химическая теория химической связи: орбитально - электростатическая концепция и принцип соответствия атомных орбиталей; двухатомные взаимодействия

в приближении орбитально–электростатической концепции; концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно–электронных взаимодействий в молекулах.

### 9. ОБРАЗЕЦ МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЯ ОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет

*Специальность:* **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**  
*Программа подготовки:* **специалитет**  
*Семестр* **5**  
*Учебная дисциплина* **Квантовая химия**

### МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА ВАРИАНТ №1

1. Обосновать методологию квантово-химического определения энергии гомолитической диссоциации химических соединений.
2. Объяснить сущность валентного приближения квантовой химии.
3. Аргументировать концепцию Бора орбитальной модели атома: показать ограниченность силового постулата стационарности электронной орбиты.
4. Определить спиновую мультиплетность возбужденное синглетное электронное состояние химических частиц вещества.
5. Квантово-химическая теория химической связи: орбитально - электростатическая концепция и принцип соответствия атомных орбиталей; двухатомные взаимодействия в приближении орбитально–электростатической концепции; концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно–электронных взаимодействий в молекулах.

Утверждено на заседании кафедры физической химии,  
 протокол № \_\_\_\_ от « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

Заведующий кафедрой  
 Преподаватель

\_\_\_\_\_  
 \_\_\_\_\_ В.М. Михальчук  
 Н.А. Туровский

#### Критерии оценивания модульного контроля

| <i>Номер задания</i> | <i>Количество баллов</i> |
|----------------------|--------------------------|
| 1.                   | 20                       |
| 2.                   | 20                       |
| 3.                   | 20                       |
| 4.                   | 20                       |
| 5.                   | 20                       |
| <b>Всего</b>         | 100                      |

### 10. ОБРАЗЕЦ ЭКЗАМЕНАЦИОННОГО БИЛЕТА

#### Теоретические вопросы к экзамену

1. Современные информационные технологии квантовой химии.
2. Создание и редактирование HyperChem модели химических соединений.
3. Методология HyperChem квантово-химического расчета.
4. Концепция ядерно - электронной структуры атома

5. Экспериментальные доказательства сложной структуры атома.
6. Объекты макро- и микромира.
7. Обоснование гипотезы Планка о квантах энергии.
8. Обоснование гипотезы Эйнштейна о квантовании энергии отрыва электронов от атомов или молекул.
9. Взаимосвязь энергии и импульса фотонов.
10. Законы сохранения энергии и импульса фотонов.
11. Планетарная модель атома (модель Резерфорда). Ее недостатки.
12. Постулат Бора о стационарных состояниях атомов, необходимое и достаточное условие стационарности электронной орбиты.
13. Обосновать квантование радиуса боровской электронной орбиты. Получить выражение для радиуса боровской электронной орбиты.
14. Обосновать квантование энергии электрона на стационарной электронной орбите. Получить выражение для энергии электрона боровской электронной орбиты.
15. Постулат Бора о электронных переходах в атомах. Квантование частот электромагнитного излучения при электронных переходах в атомах.
16. Электронные волны и уравнения де Бройля.
17. Волновой постулат де Бройля о стационарности электронных орбит.
18. Принцип неопределённости Гейзенберга.
19. Статистическое толкование волн де Бройля - постулат о состоянии объектов микромира.
20. Постулаты квантовой механики
21. Концептуальные основы квантовой механики химических частиц.
22. Постулат о способе описания состояния объектов микромира.
23. Постулат о способе определения функции состояния объектов микромира: временное уравнение Шредингера.
24. Элементы математического аппарата квантовой механики (понятие математического оператора, оператор импульса и его действие, оператор координаты и его действие., оператор времени и его действие).
25. Порядок действия пары операторов на функцию.
26. Свойства квантовомеханических операторов (условия линейности операторов, коммутирующие операторы, эрмитовы операторы).
27. Операторное уравнение на собственные значения.
28. Обосновать условие стационарного состояния химических частиц вещества.
29. Уравнение Шредингера для стационарного состояния химических частиц вещества.
30. Постулат о способе получения уравнений квантовой механики.
31. Получить одномерный оператор кинетической энергии микрочастицы.
32. Получить операторы потенциальной энергии многоатомной химической частицы.
33. Получить трехмерный оператор кинетической энергии электрона одноэлектронной химической частицы.
34. Получить оператор полной энергии одноатомной химической частицы.
35. Получить оператор полной энергии многоатомной химической частицы.
36. Постулат о среднем значении оператора Гамильтона стационарного уравнения Шредингера.
37. Постулат об антисимметричных свойствах функции состояния ансамбля объектов микромира.
38. Постулат о суперпозиции состояний объектов микромира.
39. Частица в одномерной потенциальной яме
40. Получить уравнение Шредингера для частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме.
41. Методология решения уравнения Шредингера для частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме: энергия частицы свободно движущейся в одномерной по-



- тенциальной яме; функция состояния частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме.
42. Исследовать квантование энергии частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме.
  43. Исследовать изменение функции состояния и вероятности местонахождения частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме при  $n = 1, 2, \dots, k$ . Узловые точки.
  44. Методология решения уравнения Шредингера для атома водорода.
  45. Получить уравнение Шредингера для атома водорода в декартовой системе координат.
  46. Провести анализ возможности решения уравнения Шредингера для атома водорода в декартовой системе координат.
  47. Получить уравнение Шредингера для атома водорода в сферической системе координат.
  48. Провести анализ условий решения уравнения Шредингера для атома водорода в сферической системе координат.
  49. Методология разделения уравнения Шредингера для атома водорода в сферической системе координат на R-,  $\Theta$ - и  $\Phi$ - уравнения.
  50. Условия, при которых R- уравнение для атома водорода имеет решение.
  51. Условия, при которых  $\Theta$ - уравнение для атома водорода имеет решение.
  52. Условия, при которых  $\Phi$ - уравнение для атома водорода имеет решение.
  53. Понятие и структура атомной орбитали. Квантовые числа.
  54. Квантово-химические модели атомов и молекул
  55. Получить стационарное уравнение Шредингера для ядерно-электронной квантово-химической модели атомов при условии движения ядер и электронов.
  56. Получить стационарное уравнение Шредингера для ядерно-электронной квантово-химической модели многоатомных химических частиц при условии движения ядер и электронов.
  57. Получить электронное уравнение Шредингера для квантово-химической модели атомов в приближении Борна – Оппенгеймера.
  58. Получить электронное уравнение Шредингера для квантово-химической модели многоатомной химической частицы в приближении Борна – Оппенгеймера.
  59. Обосновать переход от многоэлектронного уравнения Шредингера к системе одноэлектронных уравнений для квантово-химической модели атомов в одноэлектронном приближении Хартри.
  60. Многоэлектронная волновая функция Слейтера.
  61. Одноэлектронные уравнения Шредингера для квантово-химической модели атомов в приближении самосогласованного поля Хартри.
  62. Одноэлектронные уравнения Хартри-Фока для квантово-химической модели атомов и молекул в приближении метода Хартри – Фока.
  63. Концепция молекулярных орбиталей в квантовой химии
  64. Основные положения метода молекулярных орбиталей: молекулярная орбиталь; приближение МО ЛКАО; атомная орбиталь точные и пробные МО.; вариационная теорема; базисные функции МО.
  65. Уравнения Рутана, вековой детерминант. Методология определения энергии МО и коэффициентов при базисных функциях МО,
  66. Методология квантово-химического расчета  $H_2^{+*}$  в приближении МО ЛКАО (получить выражение для энергии МО  $H_2^{+*}$  определить значения коэффициентов при АО в связывающей и антисвязывающей МО  $H_2^{+*}$ ).
  67. Валентное приближение квантовой химии.
  68. НХФ и ОХФ приближения квантовой химии.
  69. Система МО химической частицы в НХФ приближении квантовой химии: общее число МО; число заполненных электронами и вакантных МО.

70. Система МО химической частицы в ОХФ приближении квантовой химии: общее число МО; число заполненных электронами и вакантных МО.
71. Граничные МО. ВЗМО и НВМО.
72. Орбитальный потенциал ионизации химических частиц в приближении метода МО.
73. Орбитальное сродство к электрону в приближении метода МО.
74. Функция распределения электронной плотности в химических частицах.
75. Методология определения эффективного заряда атомов химических частиц в валентном приближении метода МО.
76. Методология определения электронной плотности на атомах химических частиц в валентном приближении метода МО.
77. Методология определения электронной заселенности АО центрированных на атомах химических частиц.
78. Энергия и спиновые характеристики химических соединений
79. Электронная энергия химических соединений в приближении Хартри-Фока.
80. Энергия взаимодействия атомных ядер химических соединений в валентном приближении.
81. Полная энергия химических соединений в приближении Хартри-Фока.
82. Энергия атомизации химических соединений.
83. Электронная энергия атомов в приближении Хартри-Фока.
84. Стандартная энтальпия образования химических соединений в приближении полуэмпирической квантовой химии.
85. Электронные состояния химических соединений; основное синглетное, возбужденное синглетное, триплетное.
86. Спин и спиновая мультиплетность химических соединений в основном синглетном электронном состоянии.
87. Спин и спиновая мультиплетность химических соединений в возбужденном синглетном электронном состоянии.
88. Спин и спиновая мультиплетность химических соединений в триплетном электронном состоянии.
89. Спин и спиновая мультиплетность ионов: катионов и анионов химических частиц.
90. Спин и спиновая мультиплетность химических соединений с нечетным числом электронов: радикалов, катионов-радикалов и анион-радикалов.
91. Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии
92. Методология неэмпирических методов квантовой химии.
93. Методология полуэмпирических методов квантовой химии.
94. Процедура самосогласования молекулярных орбиталей.
95. Особенности квантово-химического моделирования неизодесмических реакций методом Хартри – Фока. Эффект электронной корреляции.
96. Электронная кулоновская корреляция.
97. Электронная корреляция Ферми.
98. Электронная «кулоновская дырка».
99. Электронная «дырка Ферми».
100. Способы учета электронной корреляции.
101. Методология DFT квантовой химии.
102. Взаимодействия в молекулах.
103. Теория химической связи.
104. Концептуальные основы теории химической связи: концепция электрохимического дуализма; концепция валентности; электронно-ионная концепция; концепция электронных пар.
105. Орбитально-электростатическая концепция в теории химической связи.
106. Принцип орбитального соответствия в теории химической связи.

107. Связывающие и антисвязывающие комбинации  $s$  – АО, которые центрированы на атомах А и В.
108. Связывающие и антисвязывающие  $\sigma$ -комбинации  $p$  – АО, которые центрированы на атомах А и В.
109. Связывающие и антисвязывающие  $\pi$ -комбинации  $p$  – АО, которые центрированы на атомах А и В.
110. Связывающие и антисвязывающие комбинации  $s$  и  $p$  – АО, которые центрированы на атомах А и В.
111. Энергия двухатомных взаимодействий ( $E_{AB}$ ) в приближении Малликена.
112. Энергия ковалентных двухатомных взаимодействий.
113. Энергия ионных двухатомных взаимодействий.
114. Энергия диссоциации химической связи.

**Образец экзаменационного билета**

**ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Химический факультет

*Специальность:* **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**  
*Программа подготовки:* **специалитет**  
*Семестр* **5**  
*Учебная дисциплина* **Квантовая химия**

**ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1**

1. Обосновать методологию квантово-химического определения орбитального потенциала ионизации химических частиц.
2. Объяснить сущность валентного приближения квантовой химии.
3. Аргументировать концепцию Бора орбитальной модели атома: показать ограниченность силового постулата стационарности электронной орбиты.
4. Определить спиновую мультиплетность возбужденное синглетное электронное состояние химических частиц вещества.
5. Сформулировать основные положения концепции Гельмана-Фейнмана о силах ядерно-электронных взаимодействий в молекулах.

Утверждено на заседании кафедры физической химии  
 Протокол № от «    » 20\_\_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ проф. Михальчук В.М.

Экзаменатор \_\_\_\_\_ доц. Туровский Н.А.

**Критерии оценивания экзамена**

| <i>Номер задания</i> | <i>Количество баллов</i> |
|----------------------|--------------------------|
| 1                    | 10                       |
| 2                    | 10                       |
| 3                    | 10                       |
| 4                    | 10                       |
| 6                    | 10                       |

|       |           |
|-------|-----------|
| Всего | 50 баллов |
|-------|-----------|

### 11. ОБРАЗЕЦ ТЕСТОВОГО ЗАДАНИЯ

|    |                                                                                                                                                                          |                                                                                                                                                                                                                                |  |
|----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
| 1. | Какое из уравнений является стационарным уравнением Шрёдингера?                                                                                                          |                                                                                                                                                                                                                                |  |
|    | 1                                                                                                                                                                        | $\hat{H}(p, q)\psi(q) = E\psi(q)$                                                                                                                                                                                              |  |
|    | 2                                                                                                                                                                        | $\hat{H}(p, q, t)\psi(q, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(q, t)$                                                                                                                                                    |  |
|    | 3                                                                                                                                                                        | $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = E\psi(t)$                                                                                                                                                                         |  |
| 2. | Условие антисимметричной волновой функции ансамбля электронов.                                                                                                           |                                                                                                                                                                                                                                |  |
|    | 1                                                                                                                                                                        | $\psi(q_1, q_2, q_3, \dots, q_n) = \psi(q_1, q_3, q_2, \dots, q_n)$                                                                                                                                                            |  |
|    | 2                                                                                                                                                                        | $\psi(q_1, q_2, q_3, \dots, q_n) = -\psi(q_1, q_3, q_2, \dots, q_n)$                                                                                                                                                           |  |
|    | 3                                                                                                                                                                        | $\psi(q_1, q_2, q_3, \dots, q_n) = -\psi(q_1, q_2, q_3, \dots, q_n)$                                                                                                                                                           |  |
| 3. | Хартри принадлежит идея рассматривать многоэлектронный атом как систему независимых электронов в поле неподвижного ядра. В таком случае гамильтониан включает операторы: |                                                                                                                                                                                                                                |  |
|    | 1                                                                                                                                                                        | кинетической энергии электронов; потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядром атома; потенциальной энергии взаимодействия электронов между собой.                                                                   |  |
|    | 2                                                                                                                                                                        | кинетической энергии электронов; потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядром атома;                                                                                                                                |  |
|    | 3                                                                                                                                                                        | кинетической энергии электронов; потенциальной энергии взаимодействия электронов между собой.                                                                                                                                  |  |
|    | 4                                                                                                                                                                        | кинетической энергии ядра, кинетической энергии электронов; потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядром атома; потенциальной энергии взаимодействия электронов между собой.                                        |  |
| 4. | Энергия многоатомной химической частицы в приближении Борна – Оппенгеймера состоит из:                                                                                   |                                                                                                                                                                                                                                |  |
|    | 1                                                                                                                                                                        | кинетической энергии ядер, кинетической энергии электронов, потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядрами и потенциальной энергии взаимодействия электронов.                                                        |  |
|    | 2                                                                                                                                                                        | кинетической энергии ядер, кинетической энергии электронов, потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядрами и потенциальной энергии взаимодействия электронов, потенциальной энергии взаимодействия ядер между собой. |  |
|    | 3                                                                                                                                                                        | кинетической энергии ядер, потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядрами и потенциальной энергии взаимодействия электронов.                                                                                         |  |
|    | 4                                                                                                                                                                        | кинетической энергии электронов, потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядрами и потенциальной энергии взаимодействия электронов.                                                                                   |  |
| 5. | Какие значения может иметь главное квантовое число $n$ :                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                |  |

|     |                                                                                                                                                                    |                                                                                                 |  |
|-----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
|     | 1                                                                                                                                                                  | $n$ может иметь значения 0, 1, 2, 3,...                                                         |  |
|     | 2                                                                                                                                                                  | $n$ может иметь значения ..., -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3,                                           |  |
|     | 3                                                                                                                                                                  | $n$ может иметь значения 1, 2, 3,...                                                            |  |
| 6.  | Какие значения может воспринимать орбитальное квантовое число $l$ при заданном значении главного квантового числа $n$ :                                            |                                                                                                 |  |
|     | 1                                                                                                                                                                  | $l$ будет изменяться от $(-n)$ к $n$ с шагом 1.                                                 |  |
|     | 2                                                                                                                                                                  | $l$ будет изменяться от 0 до $n$ с шагом 1.                                                     |  |
|     | 3                                                                                                                                                                  | $l$ будет изменяться от 1 до $n$ с шагом 1.                                                     |  |
| 7.  | Какие значения может воспринимать магнитное квантовое число $m$ при заданном значении орбитального квантового числа $l$ :                                          |                                                                                                 |  |
|     | 1                                                                                                                                                                  | $m$ будет изменяться от $(-l)$ к $+l$ с шагом 1.                                                |  |
|     | 2                                                                                                                                                                  | $m$ будет изменяться от 0 до $l$ с шагом 1.                                                     |  |
|     | 3                                                                                                                                                                  | $m$ будет изменяться от 1 до $l$ с шагом 1.                                                     |  |
| 8.  | Как в приближении МО ЛКАО рассчитывается электронная заселенность АО, которые центрированы на атомах молекул?                                                      |                                                                                                 |  |
|     | 1                                                                                                                                                                  | Удвоенная сумма квадратов собственных векторов МО по всем МО.                                   |  |
|     | 2                                                                                                                                                                  | Удвоенная сумма квадратов собственных векторов МО лишь по заполненным электронами МО.           |  |
|     | 3                                                                                                                                                                  | Квадрат собственных векторов МО.                                                                |  |
| 9.  | Рассчитать прочность С-С связи в молекуле $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$ . Выбрать те объекты, энергию которых следует рассчитать:                                    |                                                                                                 |  |
|     | 1                                                                                                                                                                  | $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$ , $\text{H}_3\text{C}^\bullet$                                      |  |
|     | 2                                                                                                                                                                  | $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$ , $\text{H}_3\text{C}^{+\bullet}$ , $\text{H}_3\text{C}^{-\bullet}$ |  |
|     | 3                                                                                                                                                                  | $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$ , $\text{CH}_3 - \text{CH}_3^{+\bullet}$ ,                          |  |
|     | 4                                                                                                                                                                  | $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$ , $\text{CH}_3 - \text{CH}_3^{-\bullet}$                            |  |
| 10. | Какое квантовое число квантует энергию электрона в атоме?                                                                                                          |                                                                                                 |  |
|     | 1                                                                                                                                                                  | магнитное.                                                                                      |  |
|     | 2                                                                                                                                                                  | главное.                                                                                        |  |
|     | 3                                                                                                                                                                  | орбитальное.                                                                                    |  |
| 11. | Какая молекулярная орбиталь $\text{H}_2$ является разрыхляющей?                                                                                                    |                                                                                                 |  |
|     | 1                                                                                                                                                                  | $\psi = -0.7071\phi_1 + 0.7071\phi_2$                                                           |  |
|     | 2                                                                                                                                                                  | $\psi = -0.7071\phi_1 - 0.7071\phi_2$                                                           |  |
|     | 3                                                                                                                                                                  | $\psi = 0.7071\phi_1 + 0.7071\phi_2$                                                            |  |
| 12. | С какой МО молекулярной системы в соответствии с теоремой Купманса связано сродство к электрону?                                                                   |                                                                                                 |  |
|     | 1                                                                                                                                                                  | ВЗМО.                                                                                           |  |
|     | 2                                                                                                                                                                  | НВМО.                                                                                           |  |
| 13. | С какой МО молекулярной системы в соответствии с теоремой Купманса связан потенциал ионизации?                                                                     |                                                                                                 |  |
|     | 1                                                                                                                                                                  | ВЗМО.                                                                                           |  |
|     | 2                                                                                                                                                                  | НВМО.                                                                                           |  |
| 14. | Каким образом в приближении МО ЛКАО рассчитываются заряды ( $q$ ) на атомах молекулярной системы? ( $Z_A$ – заряд ядра атома, $Q_A$ – электронная плотность атома) |                                                                                                 |  |
|     | 1                                                                                                                                                                  | $q = Z_A - Q_A$ .                                                                               |  |
|     | 2                                                                                                                                                                  | $q = Q_A - Z_A$ .                                                                               |  |
|     | 3                                                                                                                                                                  | $q = Z_A$ – число электронов.                                                                   |  |
|     | 3                                                                                                                                                                  | все энергетические равные последовательно заполненные                                           |  |

|     |                                                                                                                                                |                                   |                                                                                                   |  |
|-----|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
|     |                                                                                                                                                |                                   | электронами, но один электрон перенесен с ВЗМО на НВМО с изменением его спина на противоположный. |  |
| 15. | Основное уравнение квантовой механики химических частиц – уравнение *** – имеет вид ***                                                        |                                   |                                                                                                   |  |
|     | 1                                                                                                                                              | Бора, $H\psi=E\psi$               |                                                                                                   |  |
|     | 2                                                                                                                                              | Шрёдингера, $HS=E\psi$            |                                                                                                   |  |
|     | 3                                                                                                                                              | Шрёдингера, $H\psi=E\psi$         |                                                                                                   |  |
|     | 4                                                                                                                                              | Эйнштейна, $R\psi=H\psi$          |                                                                                                   |  |
| 16. | Закон сохранения энергии фотонов имеет вид                                                                                                     |                                   |                                                                                                   |  |
|     | 1                                                                                                                                              | $E + h\nu = E^* + h\nu^*$         |                                                                                                   |  |
|     | 2                                                                                                                                              | $E^* + h\nu = E + h\nu^*$         |                                                                                                   |  |
|     | 3                                                                                                                                              | $E + h = E^* + h\nu$              |                                                                                                   |  |
|     | 4                                                                                                                                              | $E + h\nu = E^* + h\nu^*$         |                                                                                                   |  |
| 17. | Согласно теореме *** электростатические силы взаимного притяжения ядра и электронов не могут обеспечить устойчивость атома                     |                                   |                                                                                                   |  |
|     | 1                                                                                                                                              | Каши.                             |                                                                                                   |  |
|     | 2                                                                                                                                              | Ирншоу.                           |                                                                                                   |  |
|     | 3                                                                                                                                              | Бора.                             |                                                                                                   |  |
|     | 4                                                                                                                                              | де Бройля.                        |                                                                                                   |  |
| 18. | Электронная орбита будет ***, если центробежная сила, обусловленная вращением электрона, будет равной силе притяжения между электроном и ядром |                                   |                                                                                                   |  |
|     | 1                                                                                                                                              | устойчивой.                       |                                                                                                   |  |
|     | 2                                                                                                                                              | не устойчивой.                    |                                                                                                   |  |
|     | 3                                                                                                                                              | не стационарной.                  |                                                                                                   |  |
|     | 4                                                                                                                                              | не зависит от условия.            |                                                                                                   |  |
| 19. | *** электронной орбиты и *** электрона должны быть дискретными величинами                                                                      |                                   |                                                                                                   |  |
|     | 1                                                                                                                                              | радиус, энергия.                  |                                                                                                   |  |
|     | 2                                                                                                                                              | радиус, масса.                    |                                                                                                   |  |
|     | 3                                                                                                                                              | протяженность, скорость движения. |                                                                                                   |  |
|     | 4                                                                                                                                              | энергия, радиус.                  |                                                                                                   |  |

## 12. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

*Распределение баллов, которые могут получить студенты  
в процессе изучения дисциплины*

| Организационно-учебная работа студента | Текущий контроль                                                                                                                                                                                                       | Всего     |
|----------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
|                                        | Тестирование<br>Письменные работы: практические задания, задания репродуктивного уровня, задания для домашней работы, контрольные работы<br>Задания к лабораторным работам<br>Устное собеседование (коллоквиум, опрос) | 50 баллов |
| max 5 баллов                           | max 45 баллов                                                                                                                                                                                                          |           |

*Шкала соответствия баллов национальной шкале*



| Сумма баллов по 100 балльной шкале | По шкале ECTS | По государственной шкале                                                                                        | При оценке экзамена преподаватель руководствуется следующими принципами                                                                                                   |
|------------------------------------|---------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 90–100                             | A             | «Отлично» (5)                                                                                                   | показаны систематические и глубокие знания при ответе на все вопросы билета, понимание физической сущности проблемы                                                       |
| 80–89                              | B             | «Хорошо» (4)                                                                                                    | показаны систематические и глубокие знания при ответе на все вопросы билета, понимание физической сущности проблемы, но при ответе допущены некоторые ошибки и неточности |
| 75–79                              | C             |                                                                                                                 | показаны систематические знания при ответе на все вопросы билета, но при ответе допущены некоторые ошибки и неточности                                                    |
| 70–74                              | D             | «Удовлетворительно» (3)                                                                                         | показаны несистематические и неглубокие знания при ответе на вопросы билета, при ответе допущено несколько ошибок, исправленных самим студентом                           |
| 60–69                              | E             |                                                                                                                 | поверхностные знания при ответе на вопросы билета, допущено ряд неточностей, которые студент не в состоянии самостоятельно исправить                                      |
| 35–59                              | FX            | «Неудовлетворительно» с возможностью повторной аттестации (2)                                                   | нет ответов на основные вопросы билета, нет ответов на дополнительные и наводящие вопросы                                                                                 |
| 0-34                               | F             | «Неудовлетворительно» (2) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов | выполнение менее 30 % обязательных заданий; неумение раскрыть основное содержание задания; неспособность формулировать выводы.                                            |

### 13. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Лекционные занятия проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийной техникой и доской. Лабораторные занятия проводятся в компьютерном классе, оборудованном компьютерами с лицензионным программным обеспечением, доступом к сети Интернет, столами, доской. Дополнительное обеспечение: Wi-Fi доступ в корпусах университета, текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета.

## 14. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

| №<br>п/п                         | Наименование                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | Кол-во эк-<br>земпляров в<br>библиотеке<br>ДонНУ | Наличие<br>электронной<br>версии в<br>ЭБС |
|----------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------|-------------------------------------------|
| <i>Основная литература</i>       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                  |                                           |
| 1.                               | Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по хим.-технол. направлениям и специальностям / В.Г. Цирельсон. – Москва: БИНОМ. Лаб. знаний, 2017. – 522 с                                                                                                                 | 1                                                | +                                         |
| 2.                               | Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по хим.-технол. направлениям и специальностям / В.Г. Цирельсон. – Москва: БИНОМ. Лаб. знаний, 2010. – 495 с.                                                                                                                | 30                                               | +                                         |
| 3.                               | Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с                                                                                                                                                                                                                         | 10                                               | +                                         |
| 4.                               | Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с                                                                                                                                                                                                    | Электронный ресурс                               | +                                         |
| 5.                               | Гришаева Т. Н. Квантовая химия супрамолекулярных систем на основе кукурбит[п]урилов [Текст] / Т. Н. Гришаева, А.Н. Масой, А.М. Кузнецов. – Москва: <a href="#">Ленанд</a> , 2016. – 208 с.                                                                                                                                                                 | Электронный ресурс                               | +                                         |
| 6.                               | Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности ВПО 020101.65 "Химия" / А.И. Ермаков. – Москва: Юрайт, 2010. – 555 с.                                                                                                                                                                 | 2                                                | +                                         |
| 7.                               | Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул / И. Майер ; пер. с англ. М.Б. Дарховского и А.М. Токмачева ; под ред. А.Л. Чугреева. – Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 384 с.                                                                                                                                  | 1                                                |                                           |
| <i>Дополнительная литература</i> |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                  |                                           |
| 8.                               | Пастернак, О. М. Основи квантової хімії : навч. посіб. / О. М. Пастернак, М. А. Туровський; Донецький нац. ун-т, хім. ф-т, каф. фіз. хімії. – Донецьк : ДонНУ, 2012. – 81 с.<br>Пастернак, Е. Н. Основы квантовой химии: учебное пособие. / Е.Н. Пастернак, Н.А. Туровский ; Донецкий нац. ун-т, хим. ф-т, каф. физ. химии. – Донецк: ДонНУ, 2012. – 81 с. | 10                                               | +) )                                      |

### 15. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. <http://mondnrjoru/> – Министерство образования и науки Донецкой Народной Республики
2. <http://resobrnadzor.ru/> – Республиканская служба по контролю и надзору в сфере образования и науки

### 16. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

*(при наличии. Обязательное наличие лицензии!!!! Или личные авторские разработки)*

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46484614);
2. Microsoft Office ((корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46472919);
3. МОРАС 2016 – комплекс программ структурной химии (программа доступа бесплатно для академического, некоммерческого использования. Академическая лицензия).
4. Microsoft Visual Studio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений);
5. Лицензия GPL, Apach, BSD для свободного программного обеспечения;
6. Антивирус Касперского;
7. Adobe Acrobat Reader.

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры физической химии с изменениями (без изменений) на \_\_\_\_\_ год.

Протокол № \_\_\_\_\_ от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

В.М. Михальчук