

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 28.09.2023 14:31:00
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

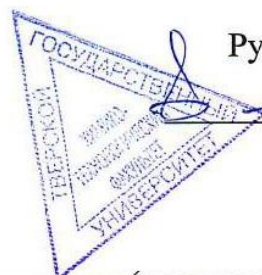
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

27 июня 2023 г



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

Дополнительные главы квантовой химии

Специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Специализация

Химия функциональных материалов

Для студентов 4 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., Русакова Н.П.

Тверь, 2023

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины:

Квантовая механика – механика движения микрочастиц (электронов, протонов и т.д.). Квантовая химия – основа теоретических представлений современной химической науки, фундаментом которой являются представления квантовой механики.

Цель дисциплины – знакомство студентов с избранными разделами квантовой химии, входящими в состав основного теоретического фундамента современной химии.

Задачи дисциплины:

- показать глубину взаимосвязи квантовой механики и квантовой химии
- выработать умение применения знаний о неэмпирических и полуэмпирических методах при работе с программным обеспечением дисциплины и т.д.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Учебная дисциплина «Дополнительные главы квантовой химии» входит в Элективные дисциплины 2 Части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Данная дисциплина является продолжением (дополнением) общего курса «Квантовая механика и квантовая химия», читаемого студентам 3-го курса (6 семестр). *Предмет дисциплины* составляет такие разделы квантовой химии (теория групп и представлений групп, симметрия и их приложения), которым уделяется малое внимания (или не уделяется вовсе) в общем курсе.

3. Объем дисциплины: 5 зачетных единиц, 180 академических часов, в том числе:

контактная аудиторная работа: лекции 36 часов, лабораторные работы 36 часов, в т.ч. практическая подготовка 36 часов;

самостоятельная работа: 72 часов, контроль 36 часов.

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР ПК-1.3 Готовит объекты исследования

ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных) ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)
--	---

5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:
экзамен в 7-м семестре.

6. Язык преподавания русский.

II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)			Самостоятельная работа (час.)	Контроль
		Лекции	Лабораторные занятия	Контроль самостоятельной работы		
1 Молекулярная система в квантовой химии	24	4	4	6	8	2
2 Элементы теории групп в квантовой механике	30	4	6	6	8	6
3 Квантовая теория атомов в молекулах	52	10	10	12	11	9
4 Электронное строение молекул (теория МО ЛКАО)	39	8	8	8	10	5
5 Колебания и вращение молекул	35	8	6	8	8	5
Итого	180	34	34	40	45	27

III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
1. Молекулярная система в квантовой химии	<ul style="list-style-type: none"> • Лекции • Лабораторные занятия • Контроль самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания) • цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,) • групповая работа
2. Элементы теории групп в квантовой механике	<ul style="list-style-type: none"> • Лекции • Лабораторные занятия • Контроль самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания) • цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,) • групповая работа

3. Квантовая теория атомов в молекулах	<ul style="list-style-type: none"> • Лекции • Лабораторные занятия • Контроль самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания) • цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,) • групповая работа • модульная работа
4. Электронное строение молекул (теория МО ЛКАО)	<ul style="list-style-type: none"> • Лекции • Лабораторные занятия • Контроль самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания) • цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,) • групповая работа
5. Колебания и вращение молекул	<ul style="list-style-type: none"> • Лекции • Лабораторные занятия • Контроль самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания) • цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,) • групповая работа • модульная работа

IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

№	Результат (индикатор)	Вид работы / способ	Критерии оценивания
1	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	вид: выполнение 12 лабораторных работ по темам-1-5 способ: на компьютере результаты: углубленная проработка темы Выполнение лабораторных работ является <i>необходимым, но не достаточным</i> условием получения положительной оценки	24 балла Выполнение 1 лабораторной работы – 2 балла
2		вид: выполнение самостоятельной работы способ: на компьютере результаты: 1. обзор темы своей научной работы, методики и объектов исследования, представленный в виде презентации 2. список патентов по заданной теме, осуществленный по базам данных, оформленный в	5 баллов – отчет по самостоятельной работе за семестр представлен в виде презентации, оформлен по требованиям, содержит информацию по всем заданиям; 4 балла – отчет по самостоятельной работе за семестр представлен в виде презентации, оформлен по требованиям, содержит информацию более 3/4 от всех заданий; 3 балла – отчет по самостоятельной работе за семестр оформлен не в

		соответствии с требованиями. Выполнение самостоятельной работы по индивидуальной теме является <i>необходимым, но не достаточным</i> условием получения положительной оценки	соответствии с требованиями, содержит информацию более 3/4 от всех заданий; 2 балла – отчет по самостоятельной работе за семестр оформлен не в соответствии с требованиями, содержит информацию более 2/4 от всех заданий; 1 балл – отчет по самостоятельной работе за семестр не полон (представлено менее 2/4 от всех заданий), не оформлен в соответствии с требованиями; 0 баллов – задания не выполнены, отчет не представлен.
3		вид: контрольная работа № 1 контрольная работа № 2 способ: традиционный результаты: оформленные по заданию бумажные бланки с решениями	10 баллов 10 баллов
4		Посещаемость	0,5 – 1 занятие (2 часа)
		Итого:	60 баллов
МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ			
<i>Своевременное выполнение лабораторных, контрольных и самостоятельной работ, посещение занятий и работа на них обучающегося (по итогам текущего контроля успеваемости) позволяют набрать студенту специалитета необходимое количество баллов для положительной оценки. В противном случае на экзамен выносятся невыполненные элементы текущего контроля успеваемости.</i>			

Шкала оценивания выполнения индикаторов:

Индикатор считается выполненным, если либо ко времени промежуточной аттестации обучающийся набрал как минимум пороговое количество баллов в результате текущего контроля за те виды активности (самостоятельная, модульные и лабораторные работы), которые отвечают за данный индикатор.

Шкала и критерии выставления оценок за дисциплину:

Шкала и критерии выставления оценок по дисциплине описаны в локальной нормативной документации Тверского государственного университета (Положение о рейтинговой системе обучения студентов ТвГУ). Положительная оценка может быть выставлена только в том случае, если выполнены все индикаторы.

V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

1) Рекомендуемая литература

а) Основная литература:

1. Ефремов, Ю.С. Квантовая механика / Ю.С. Ефремов. – Москва; Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 457 с.: ил. – Режим доступа: по подписке. –
URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273446>
2. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст]. – М., 2014. - 495 с. - (Учебник для высшей школы). – Электронный ресурс. – Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=66357
3. Барановский В. И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. Пособие для студ. высш. учеб.заведений / В. И. Барановский. - М.: Издательский центр «Академия», 2008. - 384 с Режим доступа:
<http://www.kinetics.nsc.ru/chichinin/books/spectroscopy/baranovskii08.pdf>

б) Дополнительная литература:

1. Байков Ю. А. Квантовая механика. Учебное пособие. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. - 294 с. – Электронный ресурс. – Режим доступа:
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=214306>
2. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул.: учебное пособие / Майер И., пер. с англ. 3-е издание — Москва: Лаборатория знаний, 2017. — 385 с. — ISBN 978-5-00101-501-7.
URL: <https://book.ru/book/923084>
3. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов.: учебное пособие / Цирельсон В.Г. 4-е издание — М: Лаборатория знаний, 2017. — 521 с. — ISBN 978-5-00101-502-4.
URL: <https://book.ru/book/923090>
4. Иродов, И.Е. Квантовая физика. Основные законы: учебное пособие / Иродов И.Е. 7-е издание — Москва: Лаборатория знаний, 2017. — 259 с. — ISBN 978-5-00101-492-8.
URL: <https://book.ru/book/923061>
5. Иродов, И.Е. Задачи по квантовой физике.: учебное пособие / Иродов И.Е. 5-е издание — М: Лаборатория знаний, 2015. — 220 с. — ISBN 978-5-9963-2958-8.
URL: <https://book.ru/book/923957>
6. Соболев, С.В. Основы нерелятивистской квантовой механики / С.В. Соболев. – М: Физматлит, 2017. – 143 с.: граф. – Режим доступа: по подписке. –
URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=485503>
7. Ведринский Р.В. Квантовая механика. Ростов-на-Дону: Южный федеральный университет, 2009. -384с.
Режим доступа: <http://www.phys.sfedu.ru/web/teor/Quantum1.pdf>
8. де Бройль Избранные научные труды. Т. 1. Становление квантовой физики. Работы 1921 – 1934 годов / Луи Бройль де. — М.: Логос, 2010. — 556 с. — ISBN 978-5-98704-505-3. — Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS:
URL: <http://www.iprbookshop.ru/9061.html>
9. Толмачёв, В. В. Квазиклассическая и квантовая теория атома водорода / В. В. Толмачёв, Ф. В. Скрипник. — Москва, Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, Ижевский институт компьютерных исследований, 2008. — 132 с. — ISBN 978-5-93972-642-9. — Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS:
[сайт].URL: <http://www.iprbookshop.ru/16538.html>
10. Балашов, В. В. Курс квантовой механики / В. В. Балашов, В. К. Долинов. — Москва, Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2001. — 336 с. — ISBN 5-93972-077-3.
URL: <http://www.iprbookshop.ru/16546.html>
11. Цышевский, Р.В. Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций: учебно-методическое пособие / Р.В. Цышевский, Г.Г. Гарифзянова, Г.М. Храпковский. — Казань: КНИТУ, 2012. — 88 с. — ISBN 978-5-7882-1301-9. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS :

<http://www.iprbookshop.ru/62178.html>

12. Норанович, Д. А. Основы квантово-механических представлений о строении атома : учебное пособие / Д. А. Норанович. — Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. — 100 с. — ISBN 978-5-9275-0852-5. — Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS: [сайт]. URL: <http://www.iprbookshop.ru/47053.html>

2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение:

- Microsoft Office профессиональный плюс 2013
- Microsoft Windows 10 Enterprise
- HyperChem

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Google Chrome
- ISIS Draw 2.4 Standalone
- MarvinSketch 5.2.4
- AIMQB (пакет программ AIMALL)

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- ЭБС «ZNANIUM.COM» www.znanium.com;
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <https://biblioclub.ru/>;
- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com>

4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

- Электронная образовательная среда ТвГУ <http://lms.tversu.ru>
- Научная библиотека ТвГУ <http://library.tversu.ru>
- Сайт о химии <http://www.xumuk.ru/>
- Сайт разработки программного обеспечения AIMALL <http://aim.tkgristmill.com>
- Сайт химического факультета МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>
- База данных электронного строения <http://aquila.tversu.ru>
- Открытая база данных химических соединений и их термодинамических свойств <https://webbook.nist.gov/>
- База данных спектральных характеристик органических соединений https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi

VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

1. Учебная программа

I. МОЛЕКУЛЯРНАЯ СИСТЕМА В КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Координаты, используемые для описания молекулы (лабораторная система и системы центра масс, неврещающаяся и вращающаяся). Уравнение Шредингера для молекулярной системы в лабораторной системе координат

(углубленное изучение). Разделение его на составные части: поступательное, электронное, колебательное и вращательное.

Энергетические состояния (уровни) молекул: Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Критерий существования молекулы как единой связанной устойчивой системы. Одноэлектронное приближение (орбитальная картина строения). Самосогласованное поле (ССП). Метод Хартри-Фока (ХФ): ограниченный и неограниченный. Учет электронной корреляции. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Хартри - Фока - Рутаана. Орбитали слейтеровского типа (ОСТ). Гауссовы функции (ГФ). Базисные наборы.

Неэмпирические расчеты (*ab initio*). Методы теории функционала плотности (*англ.* DFT): BLYP, B3LYP и др. Полуэмпирические методы. Методы MOX, PMX, PPP. Приближение НДП (нулевого дифференциального перекрытия): ПДП (CNDO), ЧДП (INDO), МЧДП (MINDO) и т.д. Программное обеспечение.

II. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ГРУПП В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Абстрактная теория групп. Понятие группы. Подгруппа. Классы сопряженных элементов и смежные классы. Изоморфизм и гомоморфизм групп. Прямое произведение групп. Представления групп и характеры. Неприводимые представления (НП). Разложение приводимых представлений на неприводимые. Точечные группы симметрии (углубленное изучение), их структура, прямые произведения, схемы соподчинения, классы. Представления точечных групп (типы симметрии) и таблицы характеров. Некоторые приложения симметрии (эквивалентность атомов и их взаимодействий в молекуле, число симметрии, дипольный момент, квадруполь и высшие мультиполи, эллипсоид поляризуемости).

Инвариантность гамильтониана по отношению к преобразованиям симметрии данной молекулярной системы. Собственные функции как базис представления группы.

Классификация электронных (и одноэлектронных) состояний молекул по симметрии. Типы симметрии АО. Групповые орбитали (ГО). Построение МО из АО центрального атома и ГО заместителей-лигандов в молекулах вида $AХ_n$ (углубленное изучение). Распределение электронов по связывающим, разрыхляющим и несвязывающим МО. Электронная конфигурация молекул на языке МО ЛКАО. Гибридизация АО (теоретико-групповое рассмотрение).

Корреляции НП точечных групп. Расщепление вырожденных уровней энергии при понижении симметрии (деформация, влияние электрического поля). Теория кристаллического поля и теория поля лигандов. Правила отбора для матричных элементов.

III КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ АТОМОВ В МОЛЕКУЛАХ (QTAIM).

Основные положения QTAIM. Условие нулевого потока градиента электронной плотности в описании связанного и свободного атома, критических точек. Лапласиан электронной плотности. Связь Лагранжиана и кинетической энергии с электронной плотностью системы. Использование

характеристик распределения электронной плотности для описания электронных свойств атомов, молекул. Эффективный заряд, полная электронная энергия и объем атомов в рамках топологии электронной плотности.

Матрица Гессе и её собственные значения. Использование значений кривизны для описания особенностей распределения электронной плотности на химических связях и их свойств: кратность, жесткость, кривизна, симметричность. Использование системы атомных единиц в QTAIM и её связь с международной системой СИ.

IV. ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ (теория МОЛКАО)

Электронное строение неорганических, органических и элементо-органических соединений (с позиций метода МО ЛКАО). Молекулы вида $AХ_n$ ($n = 2, 3, 4, \dots$), среди них

- линейные молекулы $BeCl_2, CO_2, XeF_2, \dots$;
- угловые молекулы $H_2O, BH_2, CH_2^+, NH_2^+, NO_2, \dots$;
- плоские молекулы $BCl_3, CH_3, CH_3^+, NO_3^-, \dots$;
- пирамидальные молекулы $NH_3, PH_3, H_2O^+, CH_3^-, \dots$;
- тетраэдрические молекулы $CH_4, BH_4^-, NH_4^+, CF_4, \dots$;
- октаэдрические молекулы $SF_6, SeF_6, PF_6^-, \dots$;
- октаэдрические комплексы вида MX_6 (без учета и с учетом π -связывания);
- более сложные молекулы: $(C_5H_5)_2Fe$ (ферроцен), $(C_6H_6)_2Cr$ (дибензолхром), $[C_2H_4PtCl_3]^- K^+$ (соль Цейзе) и др.

Сопряженные системы (в методе МОХ). Линейные полиены и моноциклические полиены (анулены). $C_5H_5^-$ (циклопентадиенил-анион), $C_7H_7^+$ (тропилий-катион), дианион $C_8H_8^{2-}$ и др. Ароматичность и антиароматичность. Альтернантные углеводороды. Хюккелевские и мебиусовские системы. Полиэдрические боргидридные анионы $B_nH_n^{2-}$ ($n = 5 \div 12$) и карбораны. Координационные соединения. Комплексы переходных металлов $AХ_n$: Двойное связывание. Карбонилы металлов $Ni(CO)_4, Fe(CO)_5, Cr(CO)_6$. Металлоорганические комплексы. Биологические комплексы (хлорофилл *a*, гем).

V. КОЛЕБАНИЯ И ВРАЩЕНИЕ МОЛЕКУЛ

Молекулярные колебания. Нормальные координаты. Нормальные колебания. Колебательное представление.

Классификация вращающихся (жестких) молекул. Асимметричный волчок (H_2O, \dots). Симметричный волчок (NH_3, \dots). Линейные молекулы (HCN, \dots). Сферический волчок (CH_4, SF_6).

Электронно-колебательные (вибронные) состояния. Теорема Яна-Теллера Электронно – колебательно - вращательные (ровибронные) состояния. Влияние ядерного спина.

2. Темы, объекты и методические указания по подготовке к лабораторным занятиям

Планы лабораторных работ и методические рекомендации по подготовке к ним разработаны в соответствии с программой дисциплины «Дополнительные главы квантовой химии» и предназначены для проведения лабораторных занятий и для самостоятельной подготовки студентов.

Лабораторные занятия по дисциплине «Дополнительные главы квантовой химии» являются одной из важнейших форм обучения студентов и проводятся с целью углубления и закрепления знаний, привития навыков поиска, обобщения и изложения материала. Развитие темы лабораторного занятия регламентируется (количество академических часов) преподавателем.

Темы лабораторных работ.

1. Методы отображения молекул в пространстве. Z-матрица и декартовы координаты. Способы их решения в квантовой химии
2. Квантово-химические расчетные программы и комплексы. Возможности и недостатки.
3. Расчетные базисы. Классификации базисов. Основы построения базисов различных базисов. Расширенные наборы Поппла.
4. Методы вычисления функционала, используемые в DFT.
5. Радиальные и угловые волновые функции в приближении Борна-Оппенгеймера. Разделение переменных.
6. Стационарные состояния молекулярной системы. Расчетываемые методом МО ЛКАО.
7. Распределение электронной плотности молекул в терминологии QTAIM. Программа AIMALL и её свободно распространяемый пакет расчета электронных характеристик AIMQB.
8. Получение электронных характеристик распределения электронной плотности на атомах в AIMQB.
9. Определение внутримолекулярных эффектов через электронные свойства молекул.
10. Получение распределения электронной плотности в критических точках связей. Анализ величин.
11. Использование собственных значений Гессiana КТ связей. Анализ величин и работа с ними.
12. Определение свойств химических связей через топологию электронной плотности в рамках «квантовой теории атомов в молекулах»

Примеры объектов исследования для лабораторных занятий

- | | |
|--|--|
| 1. $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-CH}_3$ | 5. $\text{CH}_3\text{-O-CH}_2\text{-CH}_2\text{-O-CH}_3$ |
| 2. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-NH}_2$ | 6. $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{OH})\text{-CH}_3$ |
| 3. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHCl-CH}_3$ | 7. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C}(\text{O})\text{H}$ |
| 4. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ | |

- | | |
|-------------------------------|-------------------------------|
| 8. $C(OH)H_2-CH_2-OH$ | 17. $CH_3-CHCl-CH_3$ |
| 9. $CH_3-C(O)H$ | 18. $CH_2=CH-C(O)OH$ |
| 10. $CH_3-C(O)-CH_3$ | 19. $C(O)H-C(O)H$ |
| 11. $CH_3-C(COOH)H-CH_3$ | 20. CCl_3-CH_3 |
| 12. $CH_2Cl-CHCl-CH_2Cl$ | 21. $CH_3-CH(NH_2)-CH_2-CH_3$ |
| 13. $COOH-COOH$ | 22. $CH_3-CH(NO)-CH_2-CH_3$ |
| 14. $CH_3-CH_2-CH_2-CH_3$ | 23. $CH_3-CH(SH)-CH_3$ |
| 15. $CH_3-CH_2-C(O)-CH_3$ | 24. $CH_3-CH(OH)-CH_2-COOH$ |
| 16. $CH_3-CH(OH)-CH(OH)-CH_3$ | 25. $COOH-C(O)-COOH$ |

Студент специалитета может выбрать другой объект более близкий к своей научной работе после согласования с преподавателем дисциплины.

3. Задания и контроль самостоятельной работы

Перед каждым лабораторным занятием необходима самостоятельная работа по подготовке к его выполнению по индивидуальным объектам. Для этого обучающемуся предлагаются вопросы для самостоятельной проработки. Данные, которые будут получены в результате выполнения домашнего задания, будут использованы в лабораторных работах. Все лабораторные работы, не выполненные в аудиторные часы занятий, так же остаются в качестве домашнего задания. Срок выполнения – две недели, после чего максимальное количество баллов за соответствующее задание снижается в два раза.

Самостоятельная работа по дисциплине «Дополнительные главы квантовой химии» проводится с целью углубления и закрепления полученных в ходе лекционных занятий знаний и приобретение навыков пользования рекомендованной литературой, навыков научного исследования. Самостоятельная работа начинается с работы над лекционным материалом. Она включает конспектирование лекций и последующую работу над ними. При конспектировании лекции рекомендуется на каждой странице оставлять поля для последующих записей в дополнение к конспекту. При работе над текстом лекции студенту следует обратить особое внимание на проблемные вопросы, поставленные преподавателем при чтении лекции, а так же на его задание и рекомендации.

Перечень вопросов для самостоятельной работы над материалом:

1. Молекулярное уравнение Шредингера. Разделение переменных.
2. Энергетические состояния молекул: электронные, колебательные и вращательные (их относительное расположение, переходы и т.п).
3. Потенциальная поверхность молекулы (общая характеристика).
4. Электронное уравнение Шредингера.
5. Уравнения Хартри-Фока и Хартри-Фока-Рутаана. Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии.

6. Элементы абстрактной (общей) теории групп.
 7. Точечные группы симметрии: их структура и взаимосвязи (прямые произведения, соподчинение и др.), НП групп и характеры.
 8. Инвариантность гамильтониана по отношению к операциям симметрии. Собственные функции как базис представления группы.
 9. Классификация электронных и одноэлектронных состояний по НП групп.
 10. Типы симметрии АО. Групповые орбитали (ГО).
 11. Электронное строение органических соединений.
 12. Сопряженные системы. Ароматичность и антиароматичность.
 13. Полиэдрические боргидридные анионы $B_nH_n^{2-}$ ($n = 5 \div 12$) и карбораны.
 14. Комплексы переходных металлов вида $AХ_n$. Карбонилы металлов. Ферроцен, дибензолхром. Биокомплексы.
 15. Молекулярные колебания. Нормальные координаты. Классификация нормальных колебаний (по НП группы).
 16. Классификация вращающихся (жестких) молекул. Асимметричный волчок. Симметричный волчок. Линейные молекулы. Сферический волчок.
- И т.д.

Примеры заданий для индивидуальной работы:

1. Какой командой задаётся вычисление равновесной конфигурации циклобутана в расчётном пакете программы HyperChem?
Выбрать верный вариант:

a) RNF	c) SCF
b) RMS	d) MP2

2. Какой командой задаётся приближение для вычисления радикальной структуры в программе HyperChem?
Выбрать верный вариант:

a) RMS	c) UNF
b) MP2	d) SCF

3. При моделировании определения наиболее устойчивой конформации какого-либо соединения вычисляют?
 - А. скорости вращения заместителей относительно друг друга.
 - Б. минимум потенциальной энергии
 - В. энергию связей.
 - Г. величины валентных углов.

4. Использование программы HyperChem позволяет визуализировать результаты квантово-химических расчётов. Опишите алгоритм действий при определении внутренних координат рассчитанной молекулы

5. При внесении в таблицы частотных характеристик оптимизированной геометрии соединения следует помнить, что погрешность экспериментального измерения частот составляет $\pm 1 \text{ см}^{-1}$, следовательно:

- а) округление данных проводится до сотых,
- б) округление данных проводится до десятых,
- в) округление данных проводится до единиц,
- г) округление данных искажает истинную картину теоретического исследования
- д) округления данных не производится.

6. Сравните полученную в результате квантово-химических расчётов геометрию выбранного Вами соединения с геометрическими параметрами, приведёнными в базах данных, справочниках и энциклопедиях. Составьте литературный обзор полученных результатов и оформите по нему список литературы не менее 10-12 источников.

7. Что называют группой симметрии? (выбрать верный вариант):

- а) группу всех точек вращения вокруг связи, представленных ядрами атомов и электронов
- б) группу всех ядерных конформаций квантовой системы
- с) группу всех движений, для которых данный объект является инвариантом, с композицией в качестве групповой операции

8. Какой формулой задается группа симметрии метана? (выбрать правильный вариант):

- а) S_1
- б) S_2
- с) S_3
- д) S_4

9. Оператор одноэлектронного гамильтониана является:

Выберите правильный ответ:

- а) математической моделью для описания энергии электрона в многоэлектронной системе
- б) математической моделью для описания энергии ядра в многоэлектронной системе
- с) математической моделью для описания полной электронной энергии многоэлектронной системы

10. Используя базу данных <http://aquila.tversu.ru> (на основании электронных параметров: заряд, объём)

- а) выделить переносимые фрагменты для таутомеров *n*-8-тиокарбон-октанола-1.
- б) оценить индуктивный эффект концевых заместителей для таутомеров *n*-8-тиокарбон-октанола-1.
- в) опираясь на данные по групповым зарядам составить шкалу электроотрицательностей для таутомеров *n*-8-тиокарбон-октанола-1.

11. Каким способом можно задать молекулу для квантово-химического расчёта?

- а) С помощью пространственных координат ядер
- б) С помощью структурной формулы
- в) С помощью аддитивности свойств
- г) С помощью Z-матрицы
- д) С помощью матрицы смежности

12. С точки зрения квантовой химии, с помощью базы данных <http://aquila.tversu.ru> (характеристика зарядов) определите и обоснуйте возможность проведения реакции между

- а) *гексином* и NaH
- б) *тиогексановой кислотой* и $CaCl$

13. Что дает использование приближения Борна-Оппенгеймера?

- а) Возможность рассчитать электронные свойства квантовой системы
- б) Возможность выделить в волновой функции системы радиальную и угловые составляющие
- в) Возможность выделить в гамильтониане стационарного уравнения Шредингера операторы, зависящие от угловых и радиальных степеней свободы квантовой частицы
- г) Возможность получить значения уравнения Шредингера для многоэлектронных систем

14. Покажите что понятие химии об аддитивности свойств соотносится в классическом и квантово-химическом представлениях на

- а) таблице групповых электронных энергий спиртов базы данных <http://aquila.tversu.ru>
- б) таблице групповых зарядов тиокарбоновых кислот базы данных <http://aquila.tversu.ru>
- в) таблице групповых объемов карбоновых кислот базы данных <http://aquila.tversu.ru>

4. Вопросы к экзамену

1. Адиабатический электронный потенциал, его физический смысл. ППЭ и её свойства, стационарные точки и конформации молекул.
2. Типы движения квантовой частицы: одномерный потенциальный ящик, волновая функция частицы, оператор Гамильтона
3. Квантовая теория атомов в молекулах. Основные элементы
4. Одноэлектронное приближение Хартри физический смысл, математическое отображение, недостатки

5. Волновая функция для одноэлектронного приближения, приближения Хартри-Фока, приближения МО ЛКАО – отличия, преимущества и недостатки каждой из них.
6. Постулаты квантовой механики
7. Принцип Паули и правило Хунда для квантовой системы, Планковская константа, соотношение неопределённостей Гейзенберга
8. Атом водорода в квантовой механике
9. Метод ССП
10. Особенности различных систем координат в квантовой механике. Опишите систему координат, используемую для многоэлектронных атомов и систему координат, используемую для молекул.
11. Приближение Борна-Оппенгеймера, физический смысл, математическое отображение, недостатки
12. Типы движения квантовой частицы: квантовый гармонический осциллятор, волновая функция
13. Условие ортонормированности волновой функции в квантовой механике, пять ограничений, накладываемых на волновую функцию, условия, накладываемые на операторы физических свойств.
14. Уравнение Хартри-Фока-Рутаана и его упрощение для метода МО ЛКАО
15. Базис. Базисные наборы
16. Детерминант Слейтера.
17. Квантование. Квантование физических величин
18. Мультиплетность атома
19. Вывод стационарного уравнения Шредингера.
20. Детерминант Слейтера.
21. Функции Ферми.
22. Атомные термы.
23. Спин-спиновое взаимодействие. Тонкая структура терма.
24. Система атомных единиц.
25. Силовой подход к образованию химической связи.
26. Энергетический подход к образованию химической связи
27. Образование гомоядерной молекулы.
28. Интерференция электронной плотности.
29. Кратность связи.
30. Заряды на атомах по Малликену, Лёвдину, Бейдеру.
31. Вспомогательные функции распределения электронной плотности. Теория деформационной электронной плотности
32. Вспомогательные функции распределения электронной плотности. Квантово-топологическая теория атомных взаимодействий.
33. Физическая природа химической связи.

5. Указания для обучающихся по самостоятельной работе.

Организуя свою учебную работу студенты должны, во-первых, выявить рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению

теоретического курса, применению изученного материала в лабораторных работах, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Во-вторых, ознакомиться с указанным в методическом материале по дисциплине перечнем учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнению самостоятельной работы, а также с методическими материалами на бумажных и/или электронных носителях, предоставляемых студентам преподавателем во время занятий.

Самостоятельная работа обучающихся, предусмотренная учебным планом, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Подготовка отчета по объекту самостоятельной работы

Оформление отчета происходит на русском языке. Каждая тема самостоятельной работы раскрыта и описана на отдельном листке формата А4, со всеми полями 2 см. шрифтом ТNR, кегль 12, с одиночным интервалом между строками. Вверху, справа фамилия, имя и группа обучающегося.

Подготовка презентации по объекту самостоятельной работы

Структура презентации.

Структура презентации должна соответствовать структуре разрабатываемой темы:

1. Титульный слайд (1 слайд).

Первый лист – это титульный лист, на котором обязательно должны быть представлены: название темы; план презентации (вопросы, раскрывающие тему)

2. Слайды, раскрывающие тему (9 - 10 слайдов).

Следующими слайдами должно быть содержание, где представлены основные вопросы темы. Желательно, чтобы из содержания по гиперссылке можно перейти на необходимую страницу и вернуться вновь на содержание.

3. Финальный слайд (1 слайд).

На последнем слайде должны быть выводы о проделанной работе, так же фамилия, имя, отчество студента, группа; должность, фамилия, имя, отчество преподавателя

Рекомендуемое общее количество слайдов – 10 - 12

Этапы подготовки презентации

Создание презентации состоит из следующих этапов:

I. Планирование презентации – это многошаговая процедура, включающая определение целей, изучение темы, формирование структуры и логики подачи материала. Планирование презентации включает в себя два основных этапа:

1 – Формирование материала на русском языке

Он включает в себя самую кропотливую работу с материалом и подразделяется на:

- Определение целей.
- Сбор информации о материале.
- Определение основной идеи презентации.
- Подбор дополнительной информации.
- Планирование презентации.
- Подготовка заключения.

2 – Формирование презентации на английском языке

На данном этапе требуется внимательная работа по переводу материалов на английский язык

II. Разработка презентации – методологические особенности подготовки слайдов презентации, включая вертикальную и горизонтальную логику, содержание и соотношение текстовой и графической информации.

III. Репетиция презентации – это проверка и отладка созданной презентации. Она проводится на русском языке

VII. Материально-техническое обеспечение

Для аудиторной работы

<p>Аудитория кафедры физической химии. № 408, 170002, Тверская обл., г. Тверь, пер. Садовый, д. 35</p>	<p>Столы, стулья, доска учебная, стационарный мультимедийный проектор, стационарный экран УФ-спектрометр Specord-VIS M40, ИК-спектрометр Specord-M75, лабораторный фотоэлектрический абсорбиометр-нефелометр ЛМФ-69, рефрактометр ИРФ-454 Б2М, ареометры, спектрофотометр ПромЭкоЛаб ПЭ-5400В, анализатор вольтамперометрический АКВ-07МК, магнитные мешалки, лабораторный кондуктометр Анион 4120, весы аналитические лабораторные ВЛ-120 и ВК-600, весы технические лабораторные ВЛТЭ-1100, дистиллятор UD-1100, сушильный шкаф, вытяжной шкаф, потенциометр постоянного тока, барометр анероид, электрическая плитка, рН-метры 410, стационарный мутнометр НАСН 2100NIS, лабораторные столы, лабораторная химическая посуда, реактивы MS Office 365 pro plus – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017</p>
<p>Компьютерный класс 4В (помещение для самостоятельной работы) 170002, Тверская обл., г. Тверь, пер. Садовый, д. 35</p>	<p>Столы, стулья, мультимедийный проектор, стационарный экран, Компьютеры MS Office 365 pro plus – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017; MS Windows 10 Enterprise – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017; Google Chrome – бесплатное ПО. Origin 8.1 Sr2 договор №13918/М4 от 24.09.2009 с ЗАО «СофтЛайн Трейд»; ISIS Draw 2.4 Standalone – бесплатное ПО HyperChem - акт предоставления прав № Tr008313 от 20.02.2016 г</p>

VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел I Аннотация.	Измены часы лекций и практических занятий согласно учебному плану на 2021-2022 уч. год	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Дополнен список основной и дополнительной литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета