

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 16.05.2024 13:02:41
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

24 апреля 2024 г.



Рабочая программа дисциплины

Квантовая механика и квантовая химия

Закреплена за кафедрой: **Физической химии**

Направление подготовки: **04.03.01 Химия**

Направленность (профиль): **Экспертная и медицинская химия**

Квалификация: **Бакалавр**

Форма обучения: **очная**

Семестр: **6**

Программу составил(и):
канд. хим. наук, доц., Русакова Н.П.

Тверь, 2024

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Квантовая механика – теоретический раздел физики, рассматривающий механику движения микрочастиц (электронов, протонов и т.д.). Она позволяет описать квантовые системы. Квантовая химия – теоретическая основа представлений современной химической науки. Содержание дисциплины “Квантовая механика и квантовая химия” определено следующим образом:

- основные постулаты и математический аппарат квантовой механики;
- основные положения квантовой химии;
- неэмпирические и полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул;
- качественная теория реакционной способности

Цель дисциплины – познакомить студента с идеями и методами квантовой механики и квантовой химии, составляющих основной теоретический фундамент современной химии.

Задачи:

- раскрыть основные понятия и постулаты квантовой механики,
- помочь студентам освоить математический аппарат квантовой механики
- сформировать у студентов умение применять математический аппарат квантовой механики для решения конкретных квантовомеханических задач
- 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

Цикл (раздел) ОП: Б1.О

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Физическая химия

Методика научного исследования

Органическая химия

Аналитическая химия

Физика

Математика

Новые информационные технологии

Строение вещества

Информатика

Неорганическая химия

Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Научно-исследовательская работа

Физическая химия

Дополнительные главы квантовой химии

Избранные главы физической химии

Кристаллохимия

Физические методы исследования

Физико-химические модели

Преддипломная практика

Стереохимия

и др.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	4 ЗЕТ
Часов по учебному плану	144
в том числе:	
аудиторные занятия	54
самостоятельная работа	43
часов на контроль	27

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ОПК-3.1: Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности

- Уровень 1 современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований; методами и основными программными средствами для молекулярного моделирования;
- Уровень 1 -написать уравнение Шредингера для произвольной молекулярной системы и провести разделение его на составные части;
 - ввести потенциальную (электронную) поверхность молекулы как функцию ядерных параметров и дать ей характеристику;
 - записать волновую функцию и энергию многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении;
 - раскрыть основные приближения, используемые в квантовой химии
- Уровень 1 -основные постулаты и математический аппарат (линейные эрмитовы операторы) квантовой механики
 - основные операторы квантовой механики и уравнения на собственные значения операторов с собственными функциями;
 - возможности неэмпирических и полуэмпирических методов для количественного (полуколичественного) описания электронного строения молекул (по отдельным классам соединений);
 - квантовохимическое описание атома, молекулы, элементарного акта химической реакции

ОПК-3.2: Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности

- Уровень 1 - основами работы со стандартным программным обеспечением, пакетами Office: Word, Paint, Exel, PoverPoint и их веб-версиями
 - способами формирования входного вычислительного алгоритма в "Блокнот"
- Уровень 1 Перечень стандартных программ, устанавливаемых на личный ПК и в рабочем классе, а так же основы работы с ними
- Уровень 1 Отобразить элементы предлагаемой задачи химической направленности и предложить путь решения:
 1. в виде языковой записи
 2. в виде графической схемы
 3. в виде входного пакета к квантово-химической программе

ОПК-4.1: Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности

- Уровень 1 методами вычисления интегралов
 методами построения трехмерных объектов на плоскости и навыками

- работы с ними
способами определения внутренних координат молекулы
навыками построения молекулярной параметризованной Z-матрицы
- Уровень 1 построить квантовую систему в лабораторной системе координат
задать молекулу через координаты ядер (координатный метод)
написать Z-матрицу молекулярной системы
написать уравнение Шредингера для атома водорода
- Уровень 1 Формулы кинетической и потенциальной энергии, угловой скорости, инерции, описание электрона-волны и электрона -частицы, понятие термоэлектронной эмиссии и т.д.
способы построения матриц и дифференциальных уравнений, неопределенных интегралов и систем уравнений, теоремы синусов и косинусов, и т.д.

ОПК-5.1: Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля

- Уровень 1 навыками пользователя как отдельных квантово-химических программ, так и типичного ПО.
способностью к молекулярному дизайну и эстетическим мышлением
точным и быстрым мыслительным анализом темы для правильной формулировки поискового запроса в сети интернет
- Уровень 1 Современные пакеты компьютерных программ, используемых при квантово-химических вычислениях и обработке их результата: GAMESS, GAUSSIAN, Avogadro, Shrodinger, GiperChem и т.д.
Современные поисковые системы для исследования актуальности и поиска материалов по поставленной теме
- Уровень 1 соотносить формулярное представление вещества с пространственным строением
выбирать наиболее простой путь молекулярного дизайна между большим разнообразием его элементов
осуществлять поиск по web-среде данных химического строения, элементов геометрии молекул, химических и физических свойств, и другого материала, необходимого для выполнения практических работ по квантовой механике и квантовой химии

ОПК-6.1: Представляет результаты работы в виде отчета по стандартной форме на русском языке

- Уровень 1 обширным словарным запасом и знанием русского языка
навыками создания и работы с документами на компьютере, оформления презентаций
способностью чтения входных и входных пакетов некоторых квантово-химических программ
- Уровень 1 оформить лабораторную работу, практическую работу, тему самостоятельной работы, контрольную работу и т.д. в бумажной и электронной форме
грамотно строить предложения на русском языке
провести и обосновать отличие входных и входных пакетов некоторых квантово-химических программ
- Уровень 1 способы оформления информации
методы работы с основными браузерами и стандартным программным обеспечением, устанавливаемым на персональный компьютер
основные правила работы с текстами, построения и согласования предложений

ОПК-6.4: Готовит презентацию по теме работы и представляет ее на русском и английском языках

- Уровень 1 навыками работы с графическими, текстовыми редакторами и редакторами изображений, пакетом PowerPoint
умением осуществлять поисковые запросы на интернет-ресурсах и электронных базах данных
грамотной речью и правильным изложением мысли на русском языке
- Уровень 1 выделить цели, задачи, объекты, методы, содержание, выводы презентации
отобрать иллюстрационный, графический и текстовый материал для презентации
работать с интернет-ресурсами и электронными базами данных
- Уровень 1 правила оформления и таймплэйс представления презентации
электронные базы данных, в том числе химической направленности, поисковые интернет-ресурсы

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	6

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занят.	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Семестр / Курс	Часов	Источники	Примечание
	Раздел 1. Введение					
1.1	Введение	Лек	6	1		
	Раздел 2. Математический аппарат квантовой механики					
2.1	Математический аппарат квантовой механики	Лек	6	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2 Л2.3	
2.2	Математический аппарат квантовой механики	Пр	6	4		
2.3	Математический аппарат квантовой механики	Ср	6	5		
2.4	Математический аппарат квантовой механики	Экзамен	6	3		
	Раздел 3. Основные постулаты квантовой механики					
3.1	Основные постулаты квантовой механики	Лек	6	2		
3.2	Основные постулаты квантовой механики	Пр	6	4		
3.3	Основные постулаты квантовой механики	Ср	6	5		
3.4	Основные постулаты квантовой механики	Экзамен	6	3		

	Раздел 4. Угловые моменты (моменты импульса)					
4.1	Угловые моменты (моменты импульса)	Лек	6	2		
4.2	Угловые моменты (моменты импульса)	Пр	6	4		
4.3	Угловые моменты (моменты импульса)	Ср	6	6		
4.4	Угловые моменты (моменты импульса)	Экзамен	6	4		
	Раздел 5. Квантовая механика простых систем					
5.1	Квантовая механика простых систем	Лек	6	3		
5.2	Квантовая механика простых систем	Пр	6	4		
5.3	Квантовая механика простых систем	Ср	6	6		
5.4	Квантовая механика простых систем	Экзамен	6	4		
	Раздел 6. Приближённые методы решения задач					
6.1	Приближённые методы решения задач	Лек	6	2		
6.2	Приближённые методы решения задач	Пр	6	8		
	Раздел 7. Общие вопросы квантовой химии					
7.1	Общие вопросы квантовой химии	Лек	6	2		
7.2	Общие вопросы квантовой химии	Пр	6	4		
7.3	Общие вопросы квантовой химии	Ср	6	10		
7.4	Общие вопросы квантовой химии	Экзамен	6	6		
	Раздел 8. Квантовая теория химической связи					
8.1	Квантовая теория химической связи	Лек	6	2		
8.2	Квантовая теория химической связи	Пр	6	4		
8.3	Квантовая теория химической связи	Ср	6	8		
8.4	Квантовая теория химической связи	Экзамен	6	5		
	Раздел 9. Квантовая теория химических реакций					
9.1	Квантовая теория химических реакций	Лек	6	2		
9.2	Квантовая теория химических реакций	Пр	6	4		
9.3	Квантовая теория химических реакций	Ср	6	3		

9.4	Квантовая теория химических реакций	Экзамен	6	2		
-----	-------------------------------------	---------	---	---	--	--

Список образовательных технологий

1	Активное слушание
2	Технологии развития дизайн-мышления
3	Информационные (цифровые) технологии
4	Игровые технологии
5	Проектная технология

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

1. вид: практические работы № 1 - № 10 - до 20 баллов (по 2 балла каждая)

способ: на компьютере

результаты: оформлены в виде проекта - Оформленный проект- 2 балла

2. вид:

модульная работа № 1 - до 10 баллов

модульная работа № 2 - до 10 баллов

способ: традиционный

результаты: оформленные по заданию бумажные бланки с решениями

3. вид: выполнение самостоятельной работы - до 8 баллов

способ: на компьютере

результаты: отчет, презентация на русском и английском языках,

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Темы практических занятий.

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. Программы-визуализаторы

4. Расчетные базисы. Классификации базисов. Основы построения базисов различных базисов. Расширенные наборы Поппла.

5. Методы вычисления функционала, используемые в DFT.

6. Радиальные и угловые волновые функции в приближении Борна-Оппенгеймера.

Разделение переменных.

7. Стационарные состояния молекулярной системы Рассчитываемые методом МО ЛКАО.

8. Распределение электронной плотности молекул в терминологии QTAIM.

9. Определение внутримолекулярных эффектов через электронные свойства молекул.

10. Определение свойств химических связей через топологию электронной плотности

в рамках «квантовой теории атомов в молекулах»

Примеры объектов исследования для практических занятий

1. CH₃-CH₂-CH₂-NH₂;

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

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

Перечень вопросов для самостоятельной работы над лекционным материалом:

1. Дайте определение оператора;
2. Перечислите ограничения, накладываемые на операторы физических величин в квантовой механике;
3. Перечислите основные операторы квантовой механики;
4. Выражение для коммутатора двух операторов;
5. Охарактеризуйте тензор;
6. Почему оператор задается в матричной форме?
7. Как можно задать координаты вектора?
8. Физический смысл соотношения неопределённостей;
9. Физический смысл Планковской константы;
10. Что задает волновая функция?
11. Какие условия накладываются на волновую функцию, являющуюся областью определения оператора Гамильтона?
12. Почему в кв. химии используется стационарное уравнение Шредингера?
13. Что представляет собой волновая функция системы?
14. Какие условия накладываются на волновую функцию в квантовой механике?
15. Почему в кв. химии используется стационарное уравнение Шредингера?
16. Формулировка принципа суперпозиции квантовых состояний;
17. Формулировка принципа тождественности
18. Зачем необходимо среднее значение наблюдаемой величины?
19. Что представляет собой механический момент атома?
20. Что входит в магнитный момент атома?
21. Что входит в орбитальный момент атома?
22. Что такое спин электрона?
23. Кинетическая энергия системы;
24. Через какую физическую величину можно связать инерцию с импульсом в квантовой механике?
25. Тензор момента инерции в системе центра масс;
26. Тензор момента инерции в системе главных осей;
27. Квантово-механические модели движения частицы;
28. Особенность туннельного эффекта;
29. Формула минимального значения энергии на нулевом уровне;
30. Чему равен оператор гамильтона для частицы в бесконечном потенциальном ящике? формула
31. Чему равна вероятность обнаружения частицы в бесконечном потенциальном ящике с $n=3$? формула
32. Для чего в квантовой механике атом водорода рассматривается в системе центра масс?
33. Оператор гамильтона для атома водорода.
34. Почему в волновой функции выделяют угловые и радиальную части?
35. Какая модель описывает движение электрона в атоме водорода в трёхмерном пространстве?
36. Какие элементы движения электрона в атоме водорода в трёхмерном пространстве характеризуют квантовые числа n , m , l ?

37. Для чего нужно приближение Борна-Оппенгеймера?
38. Как меняется вид волновой функции в этом приближении?
39. Что происходит с потенциальной энергией электрон-ядерных взаимодействий в приближении Борна-Оппенгеймера?
40. От чего зависит полная энергия системы в приближении Борна-Оппенгеймера?
41. Что представляет собой поверхность потенциальной энергии?
42. Для чего нужно приближение Хартри?
43. Напишите уравнение Хартри.
44. Какие недостатки у метода Хартри?.
45. Напишите уравнение Хартри-Фока.
46. Как описываются атомные электронные оболочки в разных вариантах метода Хартри-Фока?
47. Что представляет собой приближение МО ЛКАО?
48. Перечислите квантовомеханические программы, работающие с приближением МО ЛКАО;
49. Какие уравнения использует метод МО ЛКАО и в чём их физическое различие?
- И т.д.

Примеры тем для индивидуальной работы:

1. Постулаты Бора. Расчеты радиусов боровских орбит, энергий отдельных состояний, длин волн спектральных переходов
2. Линейные и самосопряженные операторы (в гильбертовом пространстве). Собственные функции и собственные значения. Матричное представление операторов.
3. Основные операторы квантовой механики: координата, импульс, момент импульса (перестановочные соотношения). Гамильтониан.
4. Основные постулаты квантовой механики.
5. Моменты импульса.
6. Энергия атома. Радиальные и угловые волновые функции. Квантовые числа. Атомные орбитали (АО). Электронные конфигурации и термы атомов. Построение Периодической системы элементов Д.И. Менделеева.
7. Уравнение Шредингера для стационарных состояний молекулярной системы. Разделение переменных.
8. Расчетные схемы квантовой химии в приближении МО ЛКАО. Неэмпирические и полуэмпирические расчеты. Базисные наборы ОСТ-3ГФ, 6-31G*, 6-31G** и т.д. Методы HF/3-21G, HF/4-31G, HF/6-31G*, MP2/6-31G*, MP3/6-31G* и т.п. Квантовомеханические программы.
9. Электронное строение молекул и молекулярных ионов C₅H₅⁻ (цикло-пентадиенил-анион), C₆H₆ (бензол), C₇H₇⁺ (тропилий-катион), C₈H₈²⁺ на языке ВС. Истолкование ароматичности.

Перечень вопросов и заданий для подготовки к рубежному контролю
Вопросы к тесту № 1:

- 1) Модель атома Резерфорда
- 2) Модель атома Бора
- 3) Модель атома Томсона
- 4) Модель атома Шредингера
- 5) Определение понятий: квантовая механика
- 6) Определение понятий: квантовая химия
- 7) Определение понятий: орбиталь по Шредингеру
- 8) Определение понятий: орбиталь по Бору
- 9) Определение понятий: изотопы
- 10) Определение понятий: радиоактивность

- 11) Определение понятий: квантовая теория атома
- 12) Определение понятий: стационарное состояние электрона
- 13) Определение понятий: оператор в квантовой механике
- 14) Определение понятий: волновая функция в квантовой механике
- 15) Определение понятий: уравнение Шредингера в квантовой химии
- 16) Определение понятий: область определения оператора
- 17) Определение понятий: наблюдаемая величина
- 18) Определение понятий: квантовое состояние
- 19) Определение понятий: комплексное сепарабельное гильбертово пространство
- 20) Определение понятий: собственный вектор оператора кв. мех
- 21) Определение понятий: матрица.
- 22) Определение понятий: тензор
- 23) Определение понятий: принцип неопределённостей Гейзенберга
- 24) Определение понятий: постоянной Планка
- 25) Определение понятий: постулат
- 26) Определение понятий: момент импульса, момент инерции
- 27) Определение понятий: боровский радиус атома
- 28) Определение понятий: скорость движения электрона в атоме
- 29) Определение понятий: главные оси тензора инерции молекулы, главные моменты инерции молекулы
- 30) Свойства операторов: сумма
- 31) Свойства операторов: произведение операторов, действие произведения операторов на волновую функцию
- 32) Свойства операторов: коммутация операторов
- 33) Свойства операторов квантовой механики: эрмитовость и линейность
- 34) Операторы квантовой механики: векторные операторы: набла и лапласа
- 35) Операторы квантовой механики: оператор кинетической энергии, оператор импульса, оператор координаты
- 36) Коммутация двух операторов: импульса и координаты
- 37) Коммутация двух операторов координат
- 38) Коммутация двух операторов импульса
- 39) Типы множеств собственных значений оператора
- 40) Типы матриц. Элементы матриц
- 41) Тензор момента инерции
- 42) Системы координат: лабораторная, система центра масс, вращающаяся
- 43) Способы задания любого вектора в двумерном пространстве. Типы координат для задания любого вектора в двумерном пространстве и их матричная форма
- 44) Принцип неопределённостей Гейзенберга – физический смысл. Пример из квантовой механики
- 45) Постоянная Планка – физический смысл, соотношение с приведённой постоянной Планка.
- 46) Постулат № 1
- 47) Постулат № 2
- 48) Постулат № 3
- 49) Постулат № 4
- 50) Постулат № 5
- 51) Постулат № 6
- 52) Постулат № 7
- 53) Орбитальный момент атома. Квантование момента импульса
- 54) Магнитный момент атома. Квантование магнитного момента
- 55) Магнитный момент электрона. Квантование спинового момента
- 56) Связь импульса и момента инерции в квантовой механике
- 57) Матрица тензора момента инерции
- 58) Кинетическая энергия вращения в квантовой механике.
- 59) Эллипсоид энергии

60) Тензор момента инерции в главных осях ЭЭ

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 TNR, 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

Требования к оформлению презентации

Оформление презентации происходит на английском языке в Power Point. Все слайды имеют следующие параметры страницы: ориентация альбомная, формат А4, размер шрифта не менее кегль 24. Оформление титульной страницы включает название, так же указан автор, место, год выполнения. Каждый слайд назван, пронумерован (за исключением титульного), оформление фона слайдов необходимо проводить в спокойных тонах, контрастных цвету выбранного шрифта.

8.3. Требования к рейтинг-контролю

На дисциплину выделено 100 баллов:

1. на экзамен выносятся до 40 баллов
2. на практикум (практические работы № 1 - № 10) - до 22 баллов
3. на модульные работы:
 - № 1 - до 10 баллов
 - № 2 - до 10 баллов
4. на выполнение самостоятельной работы - до 8 баллов

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

9.1. Рекомендуемая литература

9.1.1. Основная литература

Шифр	Литература
Л1.1	Ермаков, Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2. Квантовая химия, Москва: Юрайт, 2024, ISBN: 978-5-534-00128-0, URL: https://urait.ru/bcode/538518
Л1.2	Ермаков, Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 1. Квантовая механика, Москва: Юрайт, 2024, ISBN: 978-5-534-00127-3, URL: https://urait.ru/bcode/538517
Л1.3	Степанов, Квантовая механика и квантовая химия, Москва: Юрайт, 2019, ISBN: 978-5-534-10665-7, URL: https://urait.ru/bcode/444811
Л1.4	Барановский В. И., Квантовая механика и квантовая химия, Санкт-Петербург: Лань, 2022, ISBN: 978-5-8114-3961-4, URL: https://e.lanbook.com/book/206195
Л1.5	Цирельсон В. Г., Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов, Москва: Лаборатория знаний, 2021, ISBN: 978-5-93208-518-9, URL: https://e.lanbook.com/book/172254

9.1.2. Дополнительная литература

Шифр	Литература
Л2.1	Бондарев, Калашников, Спиринов, Курс общей физики в 3 кн. Книга 2: электромагнетизм, оптика, квантовая физика, Москва: Юрайт, 2024, ISBN: 978-5-9916-1754-3, URL: https://urait.ru/bcode/535754
Л2.2	Ефремов, Квантовая механика, Москва: Юрайт, 2024, ISBN: 978-5-534-04975-6, URL: https://urait.ru/bcode/539571
Л2.3	Бутырская Е. В., Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView, Москва: СОЛОН-ПРЕСС, 2011, ISBN: 978-5-91359-095-4, URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=226995

9.3.1 Перечень программного обеспечения

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Adobe Acrobat Reader
3	Google Chrome

4	WinDjView
5	OpenOffice
6	HyperChem
7	Многофункциональный редактор ONLYOFFICE

9.3.2 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	Журналы American Physical Society (APS)
2	Архивы журналов издательства Nature
3	Архивы журналов издательства The Institute of Physics
4	Ресурсы издательства Springer Nature
5	БД Web of Science
6	БД Scopus
7	Журналы издательства Taylor&Francis
8	Журналы American Chemical Society (ACS)
9	Журналы American Institute of Physics (AIP)
10	Виртуальный читальный зал диссертаций Российской государственной библиотеки (РГБ)
11	Репозиторий ТвГУ
12	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
13	ЭБС ТвГУ
14	ЭБС BOOK.ru
15	ЭБС «Лань»
16	ЭБС IPRbooks
17	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
18	ЭБС «ЮРАИТ»
19	ЭБС «ZNANIUM.COM»

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-243	комплект учебной мебели, компьютеры
3-226	комплект учебной мебели, Микшерный пульт, Аудиокомплект, Интерактивная система, проектор, Телекоммуникационные шкафы, экран, компьютер
3-227	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проектор, экран
5-310	Проектор Экран Компьютер (монитор, системный блок, клав., мышь) Доска - 1шт. Трибуна -1 шт. Комплект учебной мебели
5-311	Проектор Экран Компьютер (монитор, системный блок, клав., мышь) Доска - 1шт. Трибуна -1 шт. Комплект учебной мебели Стенд "Периодическая таблица

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

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. 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. Храповский. — 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
- Microsoft Windows
- Gaussian, GaussView, HyperChem, Chemoffice

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Google Chrome
- Avogadro, Gamess, Shrodinger
- MarvinSketch

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 химического факультета МГУ

<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>

VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

1. Учебная программа

I. ВВЕДЕНИЕ

Предмет квантовой механики. Квантовая механика и квантовая химия.

Основные этапы развития квантовой теории. Сложная структура атома (экспериментальные доказательства). Квантовая теория света Планка – Эйнштейна. Ядерная модель атома Резерфорда. Теория Бора (основные постулаты). Квантовые числа. Принцип Паули. Правило Хунда. Соотношение де Бройля. Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновая механика Шредингера и матричная механика Гейзенберга (эквивалентность форм). Современное состояние.

II. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Понятие оператора. Линейные и самосопряженные (эрмитовы) операторы.

Собственные функции и собственные значения операторов. Матричное представление.

III. ОСНОВНЫЕ ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Волновая функция как функция состояния системы; ее физический смысл.

Динамические переменные и операторы. Измеряемые значения

физических величин как собственные значения операторов, представляющих данную величину. Временное и стационарное уравнение Шредингера. Волновая функция системы частиц (бозонов и фермионов). Принцип тождественности частиц.

IV. УГЛОВЫЕ МОМЕНТЫ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Угловые или механические моменты частиц: орбитальный, собственный и полный.

Перестановочные соотношения. Квантование момента импульса. Собственные значения и собственные функции. Сложение моментов. Векторная модель.

V. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ПРОСТЫХ СИСТЕМ

Частица в потенциальном ящике. Гармонический осциллятор. Жесткий ротатор.

Задача об атоме водорода. Энергия атома. Радиальные и угловые волновые функции.

Квантовые числа. Атомные орбитали (АО).

VI. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие и при наличии вырождения. Вариационный принцип в квантовой механике и вариационный метод.

VII. ОБЩИЕ ВОПРОСЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Молекулярная модель. Координаты. Уравнение Шредингера для молекулярной системы. Разделение переменных. Адиабатическое приближение (приближение Борна-Оппенгеймера). Электронное уравнение Шредингера и уравнение для ядерных движений. Энергетические состояния молекул. Вероятности конфигураций ядер и электронов.

Одноэлектронное приближение. Орбитали. Теории валентных связей (ВС) и молекулярных орбиталей (МО).

Самосогласованное поле (ССП). Метод Хартри-Фока (ХФ): ограниченный (ОХФ) и неограниченный (НХФ). Учет электронной корреляции. Методы конфигурационного взаимодействия (КВ) и многоконfigurационного самосогласованного поля (МК СП). Теория возмущений Меллера-Плессета (МП) 2-го и более высоких порядков.

Приближение МО ЛКАО. Уравнения Хартри - Фока - Рутаана. Орбитали слейтеровского типа (ОСТ). Гауссовы функции (ГФ). Базисные наборы.

Неэмпирические расчеты (*ab initio*). Методы МО ЛКАО СП, МО ЛКАО СП КВ,...

Полуэмпирические расчеты. Простой метод Хюккеля (МОХ), расширенный метод Хюккеля (РМХ), метод Паризера - Парра - Попла (ППП).

Приближение нулевого дифференциального перекрытия (НДП). Методы ППДП/1, ППДП/2, ППДП/С; ЧПДП, МЧПДП/1, МЧПДП/2, МЧПДП/3, ЗЧПДП/1, ЗЧПДП/С.

Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрытием (ПДП, МПДП). Методы AM1 (Аустинская модель-1), PM3 и т.д.

Программные комплексы GAUSSIAN (GAUSSIAN-85, GAUSSIAN-98, GAUSSIAN-03,...), GAMESS (США, Англия, Россия – МГУ), HyperChem (Student HyperChem, HyperChem Professional Release), МОРАС и др.

VIII. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Квантовая теория химической связи и межмолекулярных взаимодействий, типы химической связи. Затруднения классической теории и их решение в объединённом методе. Теоремы, используемые при описании хим. связи а) силовым методом: теорема Эренфеста и теорема Гельмана-Фейнмана, б) энергетическим – теорема вириала.

IX. КВАНТОВАЯ ХИМИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности в элементарном акте химической реакции. Переходное состояние. Корреляционные правила Вудворда - Хофмана. Теория граничных орбиталей Фукуи