

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

**Дополнительные главы квантовой химии**

Закреплена за кафедрой: **Физической химии**

Направление подготовки: **04.03.01 Химия**

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

Квалификация: **Бакалавр**

Форма обучения: **очная**

Семестр: **7**

Программу составил(и):

*канд. хим. наук, доц., Русакова Н.П.*

Тверь, 2024

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

### Цели освоения дисциплины (модуля):

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:

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

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.В

### Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Квантовая механика и квантовая химия

Физическая химия

Органическая химия

Физика

Аналитическая химия

Новые информационные технологии

Строение вещества

Математика

Информатика

Неорганическая химия

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

Избранные главы физической химии

Кристаллохимия

Физические методы исследования

Научно-исследовательская работа

Преддипломная практика

Физико-химические модели

## 3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

<b>Общая трудоемкость</b>	5 ЗЕТ
Часов по учебному плану	180
<b>в том числе:</b>	
аудиторные занятия	68
самостоятельная работа	45
часов на контроль	27

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

ПК-1.1: Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР

Уровень 1 математический аппарат квантовой механики  
в общих чертах основные методы и подходы квантовой химии:

- одноэлектронное, Борна-Оппенгеймера, МО-ЛКАО;  
ограничения в которых работают данные методы
- Уровень 1 использовать математический аппарат при решении конкретных задач  
сделать выбор квантово-химического приближения для вычислений  
свойств и структуры вещества в зависимости от заданных параметров
- Уровень 1 способностью проводить физико-химические расчеты с помощью  
известных формул и уравнений для молекулярных систем, в том числе  
с помощью компьютерных программ  
навыками молекулярного моделирования и работы с разными квантово-  
химическими программами

ПК-1.2: Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся)  
для решения поставленных задач НИР

- Уровень 1 правила техники безопасности при работе в лаборатории и на  
компьютере
- Уровень 1 проводить эксперимент в лабораторных условиях и при пользовании  
компьютером
- Уровень 1 умением пользоваться методиками, используя знания норм техники  
безопасности

ПК-1.3: Готовит объекты исследования

- Уровень 1 приемы работы и создания научной графики с использованием Excel,  
Origin8.1.;
- основные макроскопические свойства молекулярных систем и их связь  
с микроскопическими свойствами  
интерфейс и возможности квантово-химических программ-  
визуализаторов;  
способы представления квантовых систем для моделирования и  
методы их описания в классических химических подходах
- Уровень 1 работать с компьютером на уровне пользователя, обрабатывать  
результаты научных экспериментов с использованием методов  
математической статистики и приложений Excel и других;  
проводить вычисление макроскопических свойств из результатов  
моделирования;  
анализировать пакеты входных и выходных данных квантово-  
химического моделирования;  
конвертировать результаты для дальнейшей работы из одного  
программного пакета в другой
- Уровень 1 навыками работы с компьютерными программами статистической и  
графической обработки экспериментальных данных с использованием  
общепринятого программного обеспечения;  
опытом составления входного расчетного пакета данных для квантово-  
химических программ;  
техникой записи молекулы координатным методом и с помощью Z-  
матрицы;  
информацией об основных квантово-химических ключах (командах) и  
их спецификации

ПК-2.1: Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с  
использованием патентных баз данных)

- Уровень 1 основные распространенные интернет-системы поиска (Google, Yandex  
и др), а так же системы химической направленности (базы данных:  
NIST, AIST, Aquila, ChemPort и др.)  
возможности поисковых сетевых ресурсов и их примерное наполнение
- Уровень 1 вести поиск информации квантово-химической направленности:  
последних публикаций по научной теме, широко известных фактов,

данных электронного строения, структуры и спектроскопических свойств исследуемых веществ, полученных как теоретическими, так и экспериментальными методами

Уровень 1 навыками работы с компьютерным программным обеспечением и интернет-ресурсами

ПК-2.2: Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

Уровень 1 методы и средства сбора, обработки, хранения, передачи и накопления информации; основные понятия логических, математических и технических аспектов архитектуры компьютеров, локальных сетей и баз данных, экспертных систем и технологии разработки и использования программного обеспечения; принципы моделирования для решения функциональных и вычислительных задач

Уровень 1 использовать вычислительную технику и программное обеспечение применительно к профессиональной деятельности, в том числе к поиску патентных материалов в области квантово-химического моделирования и электронных баз данных химического строения

Уровень 1 навыками работы в WINDOWS, MicrosoftOffice и в специализированных пакетах прикладных программ; основными информационными технологиями ввода и обработки текстовой и графической информации

## 5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	7
курсовые работы	7

## 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. Молекулярная система в квантовой химии					
1.1	Молекулярная система в квантовой химии	Лек	7	4	Л1.1Л2.1 Л2.2 Л2.3	
1.2	Молекулярная система в квантовой химии	Лаб	7	4		
1.3	Молекулярная система в квантовой химии	Ср	7	9		
1.4	Молекулярная система в квантовой химии	Экзамен	7	5		
	Раздел 2. Элементы теории групп в квантовой механике					
2.1	Элементы теории групп в квантовой механике	Лек	7	4		
2.2	Элементы теории групп в квантовой механике	Лаб	7	6		
2.3	Элементы теории групп в квантовой механике	Ср	7	9		

2.4	Элементы теории групп в квантовой механике	Экзамен	7	6		
	Раздел 3. Квантовая теория атомов в молекулах					
3.1	Квантовая теория атомов в молекулах	Лек	7	10		
3.2	Квантовая теория атомов в молекулах	Лаб	7	10		
3.3	Квантовая теория атомов в молекулах	Ср	7	9		
3.4	Квантовая теория атомов в молекулах	Экзамен	7	5		
	Раздел 4. Электронное строение молекул (теория МО ЛКАО)					
4.1	Электронное строение молекул (теория МО ЛКАО)	Лек	7	8		
4.2	Электронное строение молекул (теория МО ЛКАО)	Лаб	7	8		
4.3	Электронное строение молекул (теория МО ЛКАО)	Ср	7	9		
4.4	Электронное строение молекул (теория МО ЛКАО)	Экзамен	7	6		
	Раздел 5. Колебания и вращение молекул					
5.1	Колебания и вращение молекул	Лек	7	8		
5.2	Колебания и вращение молекул	Лаб	7	6		
5.3	Колебания и вращение молекул	Ср	7	9		
5.4	Колебания и вращение молекул	Экзамен	7	5		

### Список образовательных технологий

1	Игровые технологии
2	Проектная технология
3	Дискуссионные технологии (форум, симпозиум, дебаты, аквариумная дискуссия, панельная дискуссия, круглый стол, фасилитированная и т.д.)
4	Информационные (цифровые) технологии
5	Технологии развития критического мышления
6	Технологии развития дизайн-мышления
7	Активное слушание

## 8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

### 8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

1. вид:  
выполнение 12 практических работ по темам-1-5 (24 балла - одна работа выполнена и защищена - 2 балла)  
способ:  
на компьютере  
результаты:  
углубленная проработка темы  
Выполнение лабораторных работ является необходимым, но не достаточным условием получения положительной оценки

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 соответствии с требованиями.  
(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, 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)  
Выполнение самостоятельной работы по индивидуальной теме является необходимым, но не достаточным условием получения положительной оценки

3. вид:  
контрольная работа № 1 -10 баллов  
контрольная работа № 2-10 баллов  
способ:  
традиционный  
результаты:  
оформленные по заданию бумажные бланки с решениями, устные ответы на вопросы в виде коллоквиума

## 8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Вопросы для подготовки к первому модулю:

1. Объекты исследования квантовой химии и квантовой механики. Волновые функции, вероятности, спин
2. Плотность вероятности, электронная плотность (ЭП), поле электронной плотности, Определение критических точек электронной плотности
3. Градиент электронной плотности, линия градиента ЭП, векторное поле градиента ЭП
4. Связевые пути, распределение ЭП на них, особенности
5. Гессиян, функция Гессияна, собственные значения, матрица Гессе в главных осях кривизны.

6. Ранг и признак гессиана, сигнатура, вырожденность критических точек.
7. КТ седловой точки (связи), распределение ЭП, градиент ЭП, лапласиан ЭП, Ранг и признак гессиана
8. КТ максимума ЭП, распределение ЭП, градиент ЭП, лапласиан ЭП, Ранг и признак гессиана
9. КТ седловой точки (цикла) ЭП, распределение ЭП, градиент ЭП, лапласиан ЭП, Ранг и признак гессиана
10. КТ минимума (клетки) ЭП, распределение ЭП, градиент ЭП, лапласиан ЭП, Ранг и признак гессиана
11. Структура молекулы и приближение Борна-Оппенгеймера
12. Молекулярные графы. Эквивалентность молекулярных графов
13. Определение порядка связи и напряжения связи через значение ЭП в КТ
14. Характеристики ЭП в КТ ковалентных неполярных и характеристики ЭП в КТ ковалентных полярных связей
15. Характеристики ЭП в КТ ионных связей
16. Характеристики ЭП в КТ водородных связей и характеристики ЭП в КТ слабых взаимодействий.
17. Перпендикулярное сжатие и параллельное расширение ЭП – конкурирующие процессы при формировании связи и их отражение в собственных значениях Гессиана
18. Межатомная поверхность, её характеристика, кривизна 1 и 2

Вопросы для подготовки ко второму модулю:

1. Химическая связь как тип взаимодействия электронной плотности. Схема аддитивности, как объяснение электронных свойств молекул через электронные свойства групп.
2. Физическая природа хим. связи. Образование хим. связи между атомами. Возникающие эффекты и силы
3. Сила Гельмана – Фейнмана при образовании молекулы. Её изменение.
4. Изменение полной энергии квантовой системы и её составляющих от расстояния при образовании молекулы.
5. Парные взаимодействия и их изменение в Гамильтониане системы при образовании молекулы. Взаимодействия сферических атомов
6. Силовой и энергетический подходы в образовании химической связи.
7. Теорема о силах, действующих на одно ядро в молекуле.
8. Теорема о силах, действующих на один электрон в молекуле.
9. Энергетическая теорема – вириала
10. Волновые процессы. Интерференция волновых функций
11. Волновые процессы. Интерференция атомных орбиталей. МО ЛКАО
12. Типы АО по интерференции. Интегралы перекрывания.
13. Симметрия АО. Классификация АО по типу симметрии, четности
14. Деформационная электронная плотность. Промолекула. Стандартная деформационная ЭП.
15. Вырождение волновой функции. Запись атомного термина.
16. Карты деформационной ЭП. Их анализ.
17. Деформационная ЭП в определении зарядов по Хиршвелду

### 8.3. Требования к рейтинг-контролю

Дисциплина заканчивается экзаменом

экзамен - 40 баллов

текущий контроль, промежуточный контроль - 60 баллов

1. выполнение 12 практических работ по темам-1-5 (24 балла - одна работа выполнена и защищена - 2 балла)
  2. выполнение самостоятельной работы (5 баллов – максимум)
- Выполнение самостоятельной работы по индивидуальной теме является необходимым, но не достаточным условием получения положительной оценки

3. контрольная работа № 1 (1-я модульная)-10 баллов  
 контрольная работа № 2 (2-я модульная)-10 баллов  
 4. посещение занятий, активная работа на занятиях - 11 баллов (8 - практические, 4 - теоретические занятия)

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

### 9.1. Рекомендуемая литература

#### 9.1.1. Основная литература

Шифр	Литература
Л1.1	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: <a href="https://e.lanbook.com/book/172254">https://e.lanbook.com/book/172254</a>

#### 9.1.2. Дополнительная литература

Шифр	Литература
Л2.1	Степанов, Квантовая механика и квантовая химия, Москва: Юрайт, 2019, ISBN: 978-5-534-10665-7, URL: <a href="https://urait.ru/bcode/444811">https://urait.ru/bcode/444811</a>
Л2.2	Ермаков, Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2. Квантовая химия, Москва: Юрайт, 2021, ISBN: 978-5-534-00128-0, URL: <a href="https://urait.ru/bcode/471666">https://urait.ru/bcode/471666</a>
Л2.3	Барановский В. И., Квантовая механика и квантовая химия, Санкт-Петербург: Лань, 2022, ISBN: 978-5-8114-3961-4, URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/206195">https://e.lanbook.com/book/206195</a>

#### 9.3.1 Перечень программного обеспечения

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Adobe Acrobat Reader
3	Google Chrome
4	OpenOffice
5	paint.net
6	Java SE Development Kit
7	HyperChem

#### 9.3.2 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	Журналы American Physical Society (APS)
2	Ресурсы издательства Springer Nature
3	БД Web of Science
4	БД Scopus
5	Патентная база компании QUESTEL- ORBIT
6	Журналы American Chemical Society (ACS)



7	Журналы American Institute of Physics (AIP)
8	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
9	ЭБС BOOK.ru
10	ЭБС «Лань»
11	ЭБС IPRbooks
12	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
13	ЭБС «ЮРАИТ»
14	ЭБС «ZNANIUM.COM»

### 10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-408	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проекторы, абсорбциометр, телефоны, ареометр, барометр анероид, дрель, колонки, мешалка магнитная,
3-243	комплект учебной мебели, компьютеры

### 11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ 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](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
- Microsoft Windows 10 Enterprise
- HyperChem, AIMALL, ADF, GAUSSIAN, GaussView, ChemOffice

### б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Google Chrome
- Avogadro, GAMESS, Schrodinger
- MarvinSketch
- AIMQB (пакет программ AIMALL)

## 3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- ЭБС «ZNANIUM.COM» [www.znanium.com](http://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://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi](https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/direct_frame_top.cgi)