

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ**

«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИНЖЕНЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

_____ Василенко В.Н.

« 25 » мая 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Квантовая химия

(наименование в соответствии с РУП)

Направление подготовки (специальность)

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

(шифр и наименование направления подготовки/специальности)

Направленность (профиль)

Аналитическая химия

(наименование профиля/специализации)

Квалификация выпускника

Химик. Преподаватель химии

(в соответствии с Приказом Министерства образования и науки РФ от 12 сентября 2013 г. N 1061 "Об утверждении перечней специальностей и направлений подготовки высшего образования" (с изменениями и дополнениями))

Разработчик

(подпись)

(дата)

Шуба А.А.

(Ф.И.О.)

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой

физической и аналитической химии

(наименование кафедры, являющейся ответственной за данное направление подготовки, профиль)

(подпись)

(дата)

Кучменко Т. А.

(Ф.И.О.)

1. Цели и задачи дисциплины

1. Целью освоения дисциплины (модуля) является формирование компетенций обучающегося в области профессиональной деятельности и сфере профессиональной деятельности:

26 Химическое, химико-технологическое производство (в сфере методов и методик получения и анализа продукции, в сфере контроля качества сырья, полуфабрикатов и готовой продукции, в сфере паспортизации и сертификации продукции)

40 Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере научно-технических, опытно-конструкторских разработок и внедрения химической продукции различного назначения, в сфере метрологии, сертификации и технического контроля качества продукции).

Дисциплина направлена на решение задач профессиональной деятельности следующего типа: *научно-исследовательский - получение, обработка и анализ научно-технической информации и результатов исследований; технологический - планирование, организация и контроль проведения физико-химического контроля, валидации аналитических физико-химических методик качества сырья и материалов.*

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.

2. Перечень планируемых результатов обучения, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

№ п/п	Код компетенции	Формулировка компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
1	ОПК-3.	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	ИД1 _{опк-3} - Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности
			ИД2 _{опк-3} - Использует стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения (показатели оценивания)
ИД1 _{опк-3} - Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знает: Принципы (постулаты) квантовой механики; основные приближения, используемые в квантовой химии; возможности основных методов квантовой химии, полуэмпирические методы и модели для предсказания свойств химических соединений.
	Умеет: применять основы и принципы квантовой механики и химии для расчета движения частиц в заданных силовых полях; для расчета электронного строения конкретной молекулы, для визуализации строения и превращений молекул, для моделирования равновесных геометрических конфигураций молекул и распределений электронной плотности в молекулах
	Владеет: Навыками применения теоретических основ квантовой механики для квантово-химических расчетов с помощью полуэмпирических моделей и предсказания на их основе макроскопических свойств химических веществ.

ИД2 _{Опк-3} - Использует стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности	Знает: основы стандартного программного обеспечения для квантово-химических расчетов состояний молекул и предсказания их свойств.
	Умеет: использовать стандартное программное обеспечение для квантово-химических расчетов и базы данных по расчетным свойствам молекул (электронном строении отдельных молекул) для предсказания макроскопических свойств химических веществ и их реакционной способности.
	Владеет: навыками в выборе необходимых положений квантовой механики и методов квантовой химии в стандартном программном обеспечении для решения поставленных химических и физико-химических задач

3. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП ВО

Дисциплина относится к *обязательной части* ООП. Дисциплина является обязательной к изучению.

Изучение дисциплины основано на знаниях, умениях и навыках, полученных при изучении обучающимися дисциплин *математика, физика, неорганическая химия, аналитическая химия.*

Дисциплина является предшествующей для *изучения Коллоидная химия, Строение вещества, Наноматериалы. Основы нанотехнологий, Основы химической технологии, Производственная практика, преддипломная практика.*

4. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины (модуля) составляет 4 зачетных единиц.

Виды учебной работы	Всего ак. ч	Распределение трудоемкости по семестрам, ак. ч
		6 семестр
Общая трудоемкость дисциплины (модуля)	144	144
Контактная работа в т. ч. аудиторные занятия:	76,9	76,9
Лекции	54	54
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>	0	0
Практические/лабораторные занятия	18/0	18/0
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>	0	0
Консультации текущие	3,0	3,0
Консультации перед экзаменом	1,9	1,9
Вид аттестации (зачет/экзамен)	33,8	33,8
Самостоятельная работа:	33,3	33,3
Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	16,2	16,2
Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	17,1	17,1
Курсовой проект/работа		
Домашнее задание, реферат		
Другие виды самостоятельной работы		

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

5.1 Содержание разделов дисциплины (модуля)

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (указываются темы и дидактические единицы)	Трудоемкость раздела, акад. ч
1.	Основы квантовой механики и квантовой химии	Классическое описание структуры и динамики молекул. Механическая модель молекулы. Классические молекулярные системы. Основные положения квантовой механики. Основная задача квантовой химии.	10
2.	Описание молекулярных систем	Волновое уравнение и волновые функции. Уравнение Шредингера для молекулы. Постановка основной задачи в квантовой химии. Атомная система единиц. Оператор Гамильтона молекулярной системы. Движение поля фиксированных ядер. Электронный гамильтониан. Адиабатическое приближение и вывод ядерного уравнения. Электронное уравнение и электронный гамильтониан. Ядерное уравнение. Приближение Борна-Оппенгеймера. Поверхности потенциальной энергии. Энергетические профили химических реакций. Важность учета симметрии системы при ее движении по поверхности потенциальной энергии в ходе химических реакций. Элементы теории групп.	17,8
3.	Многоэлектронные атомы	Представление многоэлектронной функции. Одноэлектронное приближение. Принцип Паули и определитель Слейтера. Исходные допущения. Одно- и двухэлектронные интегралы. Энергия электронной подсистемы как функционал одночастичных функций. Линейный и вариационный подход в рамках решения электронной задачи. Вид уравнений Хартри-Фока. Оператор Фока. Канонический вид уравнения Хартри-Фока. Ограничения применимости уравнения.	15
4.	Метод расчета молекул	Принцип заполнения. Спиновая функция. Спиновое состояние. Спин-орбитали. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока. Базовые приближения в методе Хартри-Фока. Базовые наборы. Волновая функция атома водорода. Экспоненциальные функции Слейтера и Гауса. Примитивные и сжатые функции. Базисные наборы. Дополнения базисных наборов: поляризационные и диффузные функции. Начальные приближения для молекулярных орбиталей. Распределение электронной плотности. Электронная плотность однодетерминантной волновой функции. Распределение волновой плотности для орбитали в приближении МО ЛКАО. Схемы анализа распределения электронной плотности. Схема Малликена на примере двухатомной молекулы. Преимущества и недостатки схемы. Недостатки однотерминантного подхода. Энергия электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия. Метод многоконфигурационного	26

		самосогласованного поля. Полуэмпирические методы. Требование пространственной инвариантности. Методы в рамках полуэмпирического подхода. Введение в теорию функционала плотности. Внешний потенциал. Теорема Хоэберга-Кона и ее доказательство. Обменно-корреляционная энергия. Функционал Хоэберга-Кона. Составление названий. Построение функционалов. Основные приближения теории функционала плотности.	
5.	Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	Теорема о силах. Теорема вариала. Общий взгляд на природу химической связи. Интерференция орбиталей. Молекулярные орбитали и их классификация электронные конфигурации двухатомных молекул. Анализ заселенности орбиталей. Деформационная электронная плотность. Квантово-топологическая теория атомных взаимодействий. Силы в молекулах. Распределение энергии в молекулах. Дырка Ферми. Локализация и гибридизация орбиталей. Модели локализации. Химическая связь в координационных соединениях переходных металлов. Эффект Яна-Теллера. Заряды на атомах. Дипольные и квадрупольные моменты молекул. Молекулярный электростатический потенциал.	13
6.	Невалентные взаимодействия в молекулярных системах	Метод супермолекулы. Методы теории возмущений. Донорно-акцепторные молекулярные комплексы. Водородная связь.	12
7.	Реакционная способность	Обзор методов, рассмотренных в курсе. Функции Фукуи. Конечно-разностный подход. Сжатые функции Фукуи. Жесткость электронной подсистемы. Локальная мягкость. Относительные нуклеофильность и электрофильность.	11,5
<i>Консультации текущие</i>			3,0
<i>Консультации перед экзаменом</i>			1,9
<i>Зачет, экзамен</i>			33,8

5.2 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекции, ак. ч	Практические/лабораторные занятия, ак. Ч	СРО, ак. ч
1	Основы квантовой механики и квантовой химии	4	2	4
2	Описание молекулярных систем	10	2	5,8
3	Многоэлектронные атомы	8	3	4
4	Метод расчета молекул	14	4	8
5	Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	6	3	4
6	Невалентные взаимодействия в молекулярных системах	6	2	4
7	Реакционная способность	6	2	3,5
<i>Консультации текущие</i>			3,0	
<i>Консультации перед экзаменом</i>			1,9	
<i>Зачет, экзамен</i>			33,8	

5.2.1 Лекции

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Тематика лекционных занятий	Трудоемкость, ак. ч
1	Основы квантовой механики и квантовой химии	Сравнение классической и квантовой механики. Основные положения квантовой механики и ее математический аппарат. Предмет и задачи квантовой химии.	4
2	Описание молекулярных систем	Общие представления о квантовомеханическом описании молекулярных систем. Связь ядерной и электронной подсистем молекулы. Симметрия состояний молекулы.	10
3	Многоэлектронные атомы	Многоэлектронная задача. Уравнения Хартри-Фока.	8
4	Метод расчета молекул	Метод Хартри-Фока. Метод МО ЛКАО. Распределение электронной плотности. Недостатки однотерминантного подхода и его альтернативы. Полуэмпирические методы. Метод функционала плотности.	14
5	Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	Силовой и энергитический аспекты описания химической связи. Орбитальная картина химической связи. Пространственное распределение электронной плотности. Силы и распределение энергии в молекулах. Дырка Ферми как характеристика химической связи. Многоатомные молекулы. Характеристики молекул, зависящие от распределения заряда.	6
6	Невалентные взаимодействия в молекулярных системах	Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий. Донорно-акцепторные молекулярные комплексы. Водородная связь.	6
7	Реакционная способность	Состояния и реакционная способность молекул. Функции Фукуи. Характеристики реакционной способности молекул, зависящие от электронных характеристик атомов.	6

5.2.2 Практические занятия

Не предусмотрены

5.2.3 Лабораторный практикум

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость, ак. ч
1	Основы квантовой механики и квантовой химии	Основные положения квантовой механики и ее математический аппарат.	2
2	Описание молекулярных систем	Практическая работа 1. Рабочий стол программы Gaussview. Расчет энергии молекулы фтороводорода.	2
3	Многоэлектронные атомы	Практическая работа 2 и 3 Расчет энергии диссоциации двухатомной молекулы и энергии связи многоатомной молекулы. Опции директивы Optimization.	3

4	Метод расчета молекул	Практическая работа 4 и 5. Расчет энергий конформеров дихлорэтана в растворе циклогексана. Построение молекулярных орбиталей двух и тех атомных молекул.	4
5	Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	Практическая работа 6 и 7. Сканирование поверхностей потенциальной энергии. Расчет порядков связей в молекулах углеводородов.	3
6	Невалентные взаимодействия в молекулярных системах	Практическая работа 8. Расчет спектра молекулы воды и системы Li^+H_2O . Расчет сродства к электрону и потенциала ионизации.	2
7	Реакционная способность	Практическая работа 9. Расчет пути химической реакции. Расчет ЯМР спектра.	2

5.2.4 Самостоятельная работа обучающихся

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Вид СРО	Трудоемкость, ак. ч
1	Основы квантовой механики и квантовой химии	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	2
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	2
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
		Другие виды самостоятельной работы	
2	Описание молекулярных систем	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	3
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	2,8
		Подготовка к практическим занятиям	
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
3	Многоэлектронные атомы	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	2
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	2
		Подготовка к практическим занятиям	
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
4	Метод расчета молекул	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	5
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	3
		Подготовка к практическим занятиям	
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
5	Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	2
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	2
		Подготовка к практическим занятиям	
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
6	Невалентные взаимодействия в молекулярных системах	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	2
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	2
		Подготовка к практическим занятиям	
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
		Другие виды самостоятельной работы	

7	Реакционная способность	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	2
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	1,5
		Подготовка к практическим занятиям	
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
		Другие виды самостоятельной работы	

6 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Для освоения дисциплины обучающийся может использовать:

6.1 Основная литература

1. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. — 3-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 428 с. — ISBN 978-5-8114-3961-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/206195>. — Режим доступа: для авториз. пользователей.
- Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2. Квантовая химия : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 402 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00128-0. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/513798>
2. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 384 с. — ISBN 978-5-8114-1032-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/210257>. — Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Игнатов, С. К. Задачи по квантовой химии : учебно-методическое пособие / С. К. Игнатов. — Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2015. — 28 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/153008>. — Режим доступа: для авториз. пользователей.
4. Игнатов, С. К. Квантовая химия. Химическая связь и теория молекул : учебное пособие / С. К. Игнатов. — Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2016. — 136 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/153007>. — Режим доступа: для авториз. пользователей.
5. Благовещенский, В. В. Компьютерные лабораторные работы по физике, химии, биологии : учебное пособие / В. В. Благовещенский. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 100 с. — ISBN 978-5-8114-2610-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/210002>. — Режим доступа: для авториз. пользователей.

6.2 Дополнительная литература

1. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия : учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 441 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-534-10665-7. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/444811>.
2. Плехович, С. Д. Расчет переходных состояний методами квантовой химии : учебно-методическое пособие / С. Д. Плехович, С. В. Зеленцов. — Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2015. — 21 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/153436>. — Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Доломатов, М. Ю. Физико-химия наночастиц : учебное пособие для вузов / М. Ю. Доломатов, Р. З. Бахтизин, М. М. Доломатова. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 285 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-13077-5. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/518726>.

6.3 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся

Кучменко, Т. А. **Квантовая химия** [Электронный ресурс] : методические указания для самостоятельной работы обучающихся по направлению 04.05.01 – «Фундаментальная и прикладная химия» очной формы обучения / Т. А. Кучменко; ВГУИТ, Кафедра физической и аналитической химии. - Воронеж : ВГУИТ, 2015.– 8 с.
<http://biblos.vsuet.ru/ProtectedView/Book/ViewBook/1838>

Методические указания для обучающихся по освоению дисциплин (модулей) в ФГБОУ ВО ВГУИТ [Электронный ресурс: методические указания для обучающихся на всех уровнях высшего образования / М. М. Данылиев, Р. Н. Плотникова; ВГУИТ, Учебно-методическое управление. - Воронеж : ВГУИТ, 2015.

6.4 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Наименование ресурса сети «Интернет»	Электронный адрес ресурса
«Российское образование» - федеральный портал	https://www.edu.ru/
Научная электронная библиотека	https://elibrary.ru/defaultx.asp
Национальная исследовательская компьютерная сеть России	https://niks.su/
Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам»	http://window.edu.ru/
Электронная библиотека ВГУИТ	http://biblos.vsuet.ru/megapro/web
Сайт Министерства науки и высшего образования РФ	https://minobrnauki.gov.ru/
Портал открытого on-line образования	https://npoed.ru/
Электронная информационно-образовательная среда ФГБОУ ВО «ВГУИТ»	https://education.vsuet.ru/
Базы данных по химии	http://www.chem.msu.su/rus/library/rusdbs.html
База данных по химии	www.chemport.ru

6.5 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

При изучении дисциплины используется программное обеспечение, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы: ЭИОС университета, в том числе на базе программной платформы «Среда электронного обучения ЗКЛ», автоматизированная информационная база «Интернет-тренажеры», «Интернет-экзамен» и пр.

При освоении дисциплины используется лицензионное и открытое программное обеспечение – ОС Windows; ОС Linux, Microsoft Excel.

7 Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

При чтении лекций и проведения лабораторных занятий используется мультимедийное оборудование (интерактивная доска, проектор) факультета экологии и химической технологии и университета (а. 237, 30, 138).

Лабораторный практикум выполняется в учебных (а. 442) и научно-исследовательских (а. 431) лабораториях кафедры физической и аналитической химии, а также для отработки полученных на занятиях навыков и подготовки к практическим занятиям используется лаборатория для самостоятельной работы обучающихся (а. 439).

Лаборатории оснащены:

– комплектами мебели для учебного процесса;

- Компьютеры со свободным доступом в сеть Интернет для проведения расчетов.
Каждому студенту организуется рабочее место. Все лабораторные работы выполняются индивидуально.

8 Оценочные материалы для промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

Оценочные материалы (ОМ) для дисциплины (модуля) включают:

- перечень компетенций с указанием индикаторов достижения компетенций, этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы;
- описание шкал оценивания;
- типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков;
- методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности.

ОМ представляются отдельным комплектом и **входят в состав рабочей программы дисциплины (модуля)**.

Оценочные материалы формируются в соответствии с П ВГУИТ «Положение об оценочных материалах».

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ**

по дисциплине

Квантовая химия

1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования

№ п/п	Код компетенции	Формулировка компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
1	ОПК-3.	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	ИД1 _{ОПК-3} - Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности ИД2 _{ОПК-3} - Использует стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения (показатели оценивания)
ИД1 _{ОПК-3} - Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	<p>Знает: Принципы (постулаты) квантовой механики; основные приближения, используемые в квантовой химии; возможности основных методов квантовой химии, полуэмпирические методы и модели для предсказания свойств химических соединений.</p> <p>Умеет: применять основы и принципы квантовой механики и химии для расчета движения частиц в заданных силовых полях; для расчета электронного строения конкретной молекулы, для визуализации строения и превращений молекул, для моделирования равновесных геометрических конфигураций молекул и распределений электронной плотности в молекулах</p> <p>Владеет: Навыками применения теоретических основ квантовой механики для квантово-химических расчетов с помощью полуэмпирических моделей и предсказания на их основе макроскопических свойств химических веществ.</p>
ИД2 _{ОПК-3} - Использует стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности	<p>Знает: основы стандартного программного обеспечения для квантово-химических расчетов состояний молекул и предсказания их свойств.</p> <p>Умеет: использовать стандартное программное обеспечение для квантово-химических расчетов и базы данных по расчетным свойствам молекул (электронном строении отдельных молекул) для предсказания макроскопических свойств химических веществ и их реакционной способности.</p> <p>Владеет: навыками в выборе необходимых положений квантовой механики и методов квантовой химии в стандартном программном обеспечении для решения поставленных химических и физико-химических задач</p>

2 Паспорт оценочных материалов по дисциплине/практике

№ п/п	Разделы дисциплины	Индекс контролируемой компетенции	Оценочные средства		Технология/процедура оценивания (способ контроля)
			наименование	№№ заданий	
1	Основы квантовой механики и квантовой химии	ОПК-3	Подготовка к устному опросу на практическом занятии (лекции, учебник), экзамену	25-27	Контроль преподавателем
			Подготовка к контрольной работе. Тест.	1-3	Контроль преподавателем
2	Описание молекулярных систем	ОПК-3	Подготовка к устному опросу на практическом занятии (лекции, учебник), экзамену	28-30	Контроль преподавателем
			Подготовка презентации, Тест (лекции, учебник)	4-8,51-54	Защита презентации, доклада. Бланочное/компьютерное тестирование

3	Многоэлектронные атомы	ОПК-3	Подготовка к устному опросу на практическом занятии (лекции, учебник), экзамену	31-34	Контроль преподавателем
			Подготовка презентации, Тест (лекции, учебник)	9-14, 55-58	Защита презентации, доклада. Бланочное/компьютерное тестирование
4	Методы расчета молекул	ОПК-3	Подготовка к устному опросу на практическом занятии (лекции, учебник), экзамену	35-40	Контроль преподавателем
			Подготовка презентации, Подготовка к контрольной работе	59-62	Защита презентации, доклада. Контроль преподавателем
5	Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	ОПК-3	Подготовка к устному опросу на практическом занятии (лекции, учебник), экзамену	41-44	Контроль преподавателем
			Подготовка презентации, Тест (лекции, учебник)	15-18, 63-65	Защита презентации, доклада. Бланочное/компьютерное тестирование
6	Невалентные взаимодействия в молекулярных системах	ОПК-3	Подготовка к устному опросу на практическом занятии (лекции, учебник), экзамену	45-48	Контроль преподавателем
			Подготовка презентации, Тест (лекции, учебник)	19-21, 66-67	Защита презентации, доклада. Бланочное/компьютерное тестирование
7	Реакционная способность	ОПК-3	Подготовка к устному опросу на практическом занятии (лекции, учебник), экзамену	49-50	Контроль преподавателем
			Подготовка презентации, Тест (лекции, учебник)	22-24, 68-69	Защита презентации, доклада. Бланочное/компьютерное тестирование

3 Оценочные материалы для промежуточной аттестации.

Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Аттестация обучающегося по дисциплине/практике проводится в форме тестирования *или письменного ответа и решения контрольных задач* и предусматривает возможность последующего собеседования (зачета, экзамена).

Каждый вариант теста включает 20 контрольных заданий, из них:

- 10 контрольных заданий на проверку знаний;
- 5 контрольных заданий на проверку умений;
- 5 контрольных заданий на проверку навыков;

Или

Каждый билет включает 5 контрольных вопросов (*задач*), из них:

- 2 контрольных вопросов (*задач*) на проверку знаний;
- 2 контрольных вопросов (*задач*) на проверку умений;
- 1 контрольных вопросов (*задач*) на проверку навыков и т.п.

3.1 Тесты (тестовые задания)¹

3.1.1 _ОПК-3_ Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения _____

Номер вопроса	Тестовое задание
1	Приближение, использующее модель Хартри-Фока-Рутана и учитывающее свободные d-орбитали обозначается: a) CSID/6-31G* b) MINDO/3 c) RHF/STO-3G d) RHF/3-21G e) CINDO/2 f) RHF/6-31G*.
2	Выполнение принципа Паули приводит к тому, что a) волновая функция антисимметрична при перестановке двух электронов b) в атоме не может быть двух электронов с одинаковым набором всех квантовых чисел c) в атоме не может быть двух электронов с одинаковым спином d) два электрона не могут находиться вблизи одной точки пространства e) все орбитали в атоме имеют разную энергию f) в атоме не может быть двух электронов с одинаковой энергией g) волновая функция симметрична при перестановке двух электронов h) волновая функция в методе Хартри-Фока записывается в виде детерминанта Слейтера.
3	Скорость реакции в теории переходного состояния определяется a) энергией реагентов b) энергией продуктов c) энергией переходного состояния
4	Истинные утверждения для метода Хартри (приближения независимых частиц) a) не учитывается кинетическая энергия электронов b) гамильтониан можно представить как сумму одно- и двухэлектронных операторов c) не учитывается взаимодействие между электронами d) не учитывается взаимодействие между ядром и электронами e) можно представить как сумму операторов, каждый из которых зависит только от координат одного
5	Молекулярный электростатический потенциал a) определяется только формой ВЗМО b) оказывает влияние на конформационное поведение молекул c) определяется только формой НВМО d) позволяет предсказывать направление протекания химических реакций
6	Оценка электронной заселённости атомов путём деления заселённости перекрывания орбиталей между каждой рассматриваемой парой атомов пополам без учёта природы атомов используется в схеме a) Малликена b) NBO c) Лёвдина d) Бейдера
7	От выбора координат расчёта ППЭ не зависят a) положение максимумов b) положение минимумов c) форма пути реакции d) положение Седловых точек
8	Первая поправка по теории возмущений к методу Хартри-Фока a) всегда отрицательна b) описывает около 90% корреляционной энергии c) всегда положительна d) равна нулю e) описывает более половины корреляционной энергии
9	В качестве индексов реакционной способности могут быть использованы a) энергии граничных МО b) электронная энергия продуктов

	<p>с) заряды на атомах d) энергия реагентов e) порядки связей</p>
10	<p>Энергия, получаемая при расчёте методом UHF обычно ниже, чем методом RHF a) т.к. в расчёте UHF электроны всегда не спарены, что понижает энергию за счёт их меньшего отталкивания b) т.к. это систематическая ошибка метод в RHF с) использование двух наборов орбиталей в методе UHF позволяет построить более точные волновые функции, чем в RHF d) эта закономерность не имеет объяснения e) т.к. это систематическая ошибка метода UHF</p>
11	<p>Общие требования к волновой функции. Волновая функция χ, t должна быть: a) симметричной b) однозначной c) конечной d) определена во все области изменения переменных e) непрерывной f) антисимметричной</p>
12	<p>Полуэмпирические методы a) MINDO/3 b) CISD c) RHF/3-21G d) PM3 e) AM1</p>
13	<p>Метод Хартри-Фока-Рутана отличается от метода Хартри-Фока a) введением приближения МО ЛКАО b) инвариантностью относительно ортогональных преобразований МО с) введением приближения самосогласованного поля d) более полным учётом электронного отталкивания e) учётом интеграла перекрывания</p>
14	<p>Суперпозиционная ошибка базисного набора при расчёте межмолекулярных комплексов a) завышает оценку энергии системы b) не зависит от используемого базиса c) не зависит от используемого метода расчета d) зависит от используемого базиса e) занижает оценку энергии системы f) зависит от используемого метода расчёта</p>
15	<p>Увеличение базисных функций в расчёте RHF a) уменьшает полную энергию молекулы b) увеличивает полную энергию молекулы c) не изменяет полную энергию молекулы d) результат определяется также строением выбранной молекулы</p>
16	<p>Системы, которые можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока a) Cl₂ b) NO c) PF₅ d) Cl e) Na f) C₆H₆</p>
17	<p>Основой для введения адиабатического приближения служит a) малая величина кинетической энергии электронов b) электронная волновая функция c) слабое электростатическое взаимодействие между электронной и ядерной подсистемами d) малая величина кинетической энергии ядер e) медленно меняющаяся функция ядерных координат f) большая масса ядер по сравнению с массой электронов</p>
18	<p>Для электроциклических реакций системы, содержащей 4n электронов a) фотохимически разрешён дисротаторный механизм b) термически разрешён конротаторный механизм c) термически разрешён дисротаторный механизм d) фотохимически разрешён конротаторный механизм</p>
19	<p>Неограниченный метод Хартри-Фока a) UHF b) HF c) HXФ d) CIS e) RHF</p>
20	<p>Для расчёта электронных спектров молекул лучше использовать a) CNDO/S b) PM3 c) MINDO/3 d) CNDO/2 e) RHF/3-21G</p>
21	<p>Расчитанные дипольные моменты равны нулю в молекулах a) O₃ b) H₂O c) транс-CH₂Cl=CH₂Cl d) цис- CH₂Cl=CH₂Cl e) H₂</p>
22	<p>В теории кристаллического поля a) электронное строение центрального атома рассматривается явно b) электронное строение лигандов рассматривается явно c) электронное строение центрального атома рассматривается феноменологически d) электронное строение лигандов рассматривается феноменологически</p>
23	<p>При решении квантово-химических задач традиционно учитывают взаимодействия a) электростатическое b) кулоновское c) сильное d) гравитационное e) слабое</p>
24	<p>Волновая функция молекулы в методе Хартри-Фока-Рутана представляет собой a) сумму всех атомных орбиталей b) сумму всех молекулярных орбиталей c) произведение всех атомных орбиталей d) детерминант Слейтера, составленный из молекулярных орбиталей e) линейную комбинацию атомных орбиталей.</p>

3.2 Экзамен (вопросы к экзамену, коллоквиуму, контрольной работе)

3.2.1 ОПК-3_ Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств

веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения

Вопросы (задачи, задания) для экзамена, зачета

Номер вопроса	Формулировка вопроса
25	Исторические сведения. Квантовая теория света Планка-Эйнштейна. Ядерная модель Резерфорда. Теория Бора. Возникновение квантовой механики. Развитие квантовой химии.
26	Корпускулярно-волновой дуализм вещества. Формула де Бройля
27	Принцип неопределенности Гейзенберга. Доказать, что в молекуле HCl орбитали 1s, 2s, 2p и 3s атома хлора не могут комбинировать с какой-либо из орбиталей атома водорода
28	Собственные функции и собственные значения операторов .Линейные самосопряженные (эрмитовы) операторы. Покажите что 1) оператор линейным не является; 2) оператор d/dx является линейным, но не эрмитовым; 3) операторы $i \frac{d}{dx}$ и $\frac{d^2}{dx^2}$ линейны и эрмитовы
29	Оператор Гамильтона в квантовой химии и его значение. Уравнение Шредингера в квантовой механике – основное уравнение для оценки поведения электронов.
30	Волновые уравнения в квантовой механике. Уравнения для стационарных состояний.
31	Движение электрона в центально-симметричном и кулоновском поле. Атом водорода.
32	Набор квантовых чисел для стационарных орбиталей. Поведение электронов в магнитном поле. Энергия электрона на орбите в атоме водорода согласно Бору выражается $E_n = -me^4 / 2\hbar^2 n^2$ ($n = 1, 2, 3, \dots$). Определите уровень с наименьшей энергией (в эВ).
33	Атомные орбитали многоэлектронных атомов. Полная волновая функция. Сферическая гармоника и угловая зависимость атомных орбиталей. Рассчитать эффективные заряды атомных орбиталей для атомов N, N ⁺ , N ⁻ , N ²⁻ .
34	Атомные орбитали гомоядерных двухатомных молекул. Связывающие и разрыхляющие орбитали. Физический смысл не связывающих орбиталей
35	Гетероядерные двухатомные молекулы. Волновая функция и интеграл перекрывания
36	Энергия орбитали двухатомных молекул. Методика вычисления. Правило симметрии. Тождественность частиц.
37	Принцип суперпозиции в квантовой механике. Принцип антисимметрии. Детерминант Слейтера
38	Устойчивость боровской орбиты и длина волны Де Бройля. Запишите уравнение Шредингера для молекулы водорода в адиабатическом приближении
39	Частица в потенциальном ящике. Гармонический осциллятор. Жесткий ротатор
40	Приближенные методы: теория возмущений; вариационный метод
41	Молекулярное уравнение Шредингера, разделение переменных. Адиабатическое приближение
42	Молекулярные орбитали и природа химической связи. Интеграл перекрывания. Процедура определения интегралов с помощью таблиц характеров
43	Ионная связь и ковалентная в рамках метода МО. Донорно-акцепторных характер химической связи.
44	Слабые химические связи (водородные связи, силы Ван-дер-ваальса и др.) в молекулярных системах
45	Природа химической связи в нанокompозитных материалах. Сопряженные системы. Ароматичность и антиароматичность. Хюккелевские и мебиусовские системы
46	Пространственная и точечная симметрия. Доказать, что в молекуле HCl орбитали 1s, 2s, 2p и 3s атома хлора не могут комбинировать с какой-либо из орбиталей атома водорода
47	Определение абстрактной математической группы. Основы теории представлений. Группы симметрии. Таблицы характеров
48	Энергетические состояния молекул: электронные, колебательные и вращательные (их относительное расположение, переходы и т.п).
49	Потенциальная поверхность молекулы (общая характеристика). Электронное строение органических соединений
50	Уравнения Хартри-Фока и Хартри-Фока-Рутаана. Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии

3.3. Презентации (приблизительное название тем)

3.3.1 ОПК-3_ Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения

Номер вопроса	Тема презентаций
51	Физическое объяснение основных понятий квантовой механике.
52	Постановка задачи в квантовой механике.
53	Применение операторов в квантовой механике.
54	Матрицы в квантовой механике. Свойства матриц.
55	Вариационный метод в квантовой механике, расчеты в квантовой химии
56	Типы химических связей.
57	Атомные орбитали (s-, p-, d-, f- электроны).
58	Донорно-акцепторный характер химических связей в комплексных соединениях.
59	Значение квантовой химии в теории валентности.
60	Волновая функция и ее свойства.
61	Операторы в квантовой механике.
62	Волновая функция и измерения.
63	Матрица в квантовой механике.
64	Уравнения Шредингера в квантовой механике и его свойства.
65	Квантовые числа и форма атомных орбиталей.
66	Простейшая модель ковалентной связи.
67	Ионная связь.
68	Слабые связи: водородная связь, силы Ван-дер-ваальса.
69	Донорно-акцепторная связь.

4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Процедуры оценивания в ходе изучения дисциплины знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций, регламентируются положениями:

- П ВГУИТ 2.4.03 Положение о курсовых экзаменах и зачетах;

- П ВГУИТ 4.1.02 Положение о рейтинговой оценке текущей успеваемости

Для оценки знаний, умений, навыков студентов по дисциплине «Квантовая химия» применяется средневзвешенная оценка балльно-рейтинговой системы.

Рейтинговая система оценки осуществляется в течение всего семестра при проведении аудиторных занятий. Показателем оценки знаний является текущий опрос в виде собеседования, сдачи тестов, написания контрольной работы. За каждый правильный ответ обучающийся получает 5 баллов (зачтено - 5, незачтено - 0). Максимальное число баллов по результатам текущей работы в семестре 50.

Бальная система служит для получения экзамена и зачета по дисциплине. Максимальное число баллов за семестр — 100.

Максимальное число баллов по результатам текущей работы в семестре – 50.

Максимальное число баллов на экзамене и/или зачете – 50.

Минимальное число баллов за текущую работу в семестре – 30.

Обучающийся, набравший в семестре менее 30 баллов, может заработать дополнительные баллы, отработав соответствующие разделы дисциплины или выполнив обязательные задания, для того, чтобы быть допущенным до экзамена и зачета.

Обучающийся, набравший за текущую работу менее 30 баллов, т.к. не выполнил всю работу в семестре по объективным причинам (болезнь, официальное освобождение и т.п.) допускается до экзамена и/или зачета, однако ему дополнительно задаются вопросы на собеседовании по разделам, выносимым на экзамен и/или зачет.

В случае неудовлетворительной сдачи экзамена и зачета обучающемуся предоставляется право повторной сдачи в срок, установленный для ликвидации академической

задолженности по итогам соответствующей сессии. При повторной сдаче экзамена и/или зачета количество набранных студентом баллов на предыдущем экзамене и/или зачете не учитывается.

Экзамен и зачет может проводиться в виде тестового задания и задач, или собеседования и задач.

Для получения оценки «отлично» суммарная бально-рейтинговая оценка обучающегося по результатам работы в семестре и на экзамене должна составлять 90 и выше баллов;

- оценки «хорошо» суммарная бально-рейтинговая оценка обучающегося по результатам работы в семестре и на экзамене должна составлять от 75 до 89,99 баллов;

- оценки «удовлетворительно» суммарная бально-рейтинговая оценка обучающегося по результатам работы в семестре и на экзамене должна составлять от 60 до 74,99 баллов;

- оценки «неудовлетворительно» суммарная бально-рейтинговая оценка обучающегося по результатам работы в семестре и на экзамене должна составлять менее 60 баллов.

Для получения оценки «зачтено» суммарная бально-рейтинговая оценка обучающегося по результатам работы в семестре и на зачете должна быть не менее 60 баллов.

5. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания для каждого результата обучения по дисциплине/практике

Результаты обучения по этапам формирования компетенций	Предмет оценки (продукт или процесс)	Показатель оценивания	Критерии оценивания сформированной компетенций	Шкала оценивания	
				Академическая оценка или баллы	Уровень освоения компетенции
ОПК-3 - Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения					
Знать: Принципы (постулаты) квантовой механики; основные приближения, используемые в квантовой химии; возможности основных методов квантовой химии, полуэмпирические методы и модели для предсказания свойств химических соединений, основы стандартного программного обеспечения для квантово-химических расчетов состояний молекул и предсказания их свойств.	Тест	Результат тестирования	Более 75 % правильных ответов	Отлично	Освоена (повышенный)
			60-75 % правильных ответов	Хорошо	Освоена (повышенный)
			50-60 % правильных ответов	Удовлетворительно	Освоена (базовый)
			Менее 50 % правильных ответов	Неудовлетворительно	Не освоена
	Презентация	Презентация, доклад	В докладе представлена полная и точная информация по теме. Описаны полностью требования к объектам по тематике работы.	Отлично	Освоена (повышенный)
			В докладе представлена полная и точная информация по теме. Описаны полностью требования к объектам по тематике работы, допущены некоторые неточности, не полностью отражена информация	Хорошо	Освоена (повышенный)
			В докладе представлена полная и точная информация по теме. Описаны некоторые требования к объектам по тематике работы, не полностью отражена информация, в работе имеются ошибки, не имеющие принципиального значения.	Удовлетворительно	Освоена (базовый)
			В докладе не представлена информация по теме.	Неудовлетворительно	Не освоена
	Контрольная Работа, опрос, экзамен	Результат контрольной работы	Более 75 % правильных ответов	Отлично	Освоена (повышенный)
			60-75 % правильных ответов	Хорошо	Освоена (повышенный)
			50-60 % правильных ответов	Удовлетворительно	Освоена (базовый)

			Менее 50 % правильных ответов	Неудовлетворительно	Не освоена
<p>Уметь: применять основы и принципы квантовой механики и химии для расчета движения частиц в заданных силовых полях; для расчета электронного строения конкретной молекулы, для визуализации строения и превращений молекул, для моделирования равновесных геометрических конфигураций молекул и распределений электронной плотности в молекулах, использовать стандартное программное обеспечение для квантово-химических расчетов и базы данных по расчетным свойствам молекул (электронном строении отдельных молекул) для предсказания макроскопических свойств химических веществ и их реакционной способности.</p> <p>Владеть: Навыками применения теоретических основ квантовой механики для квантово-химических</p>	Тест	Результат тестирования	Более 75 % правильных ответов	Отлично	Освоена (повышенный)
			60-75 % правильных ответов	Хорошо	Освоена (повышенный)
			50-60 % правильных ответов	Удовлетворительно	Освоена (базовый)
			Менее 50 % правильных ответов	Неудовлетворительно	Не освоена
	Презентация	Презентация, доклад	В докладе представлена полная и точная информация по теме. Описаны полностью требования к объектам по тематике работы.	Отлично	Освоена (повышенный)
			В докладе представлена полная и точная информация по теме. Описаны полностью требования к объектам по тематике работы, допущены некоторые неточности, не полностью отражена информация	Хорошо	Освоена (повышенный)
			В докладе представлена полная и точная информация по теме. Описаны некоторые требования к объектам по тематике работы, не полностью отражена информация, в работе имеются ошибки, не имеющие принципиального значения.	Удовлетворительно	Освоена (базовый)
			В докладе не представлена информация по теме.	Неудовлетворительно	Не освоена
	Контрольная Работа, опрос, экзамен	Результат контрольной работы	Более 75 % правильных ответов	Отлично	Освоена (повышенный)
			60-75 % правильных ответов	Хорошо	Освоена (повышенный)
			50-60 % правильных ответов	Удовлетворительно	Освоена (базовый)
			Менее 50 % правильных ответов	Неудовлетворительно	Не освоена
	Тест	Результат тестирования	Более 75 % правильных ответов	Отлично	Освоена (повышенный)
60-75 % правильных ответов			Хорошо	Освоена (повышенный)	
50-60 % правильных ответов			Удовлетворительно	Освоена	

расчетов с помощью полуэмперических моделей и предсказания на их основе макроскопических свойств химических веществ, навыками в выборе необходимых положений квантовой механики и методов квантовой химии в стандартном программном обеспечении для решения поставленных химических и физико-химических задач				о	(базовый)
			Менее 50 % правильных ответов	Неудовлетворительно	Не освоена
	Презентация	Презентация, доклад	В докладе представлена полная и точная информация по теме. Описаны полностью требования к объектам по тематике работы.	Отлично	Освоена (повышенный)
			В докладе представлена полная и точная информация по теме. Описаны полностью требования к объектам по тематике работы, допущены некоторые неточности, не полностью отражена информация	Хорошо	Освоена (повышенный)
			В докладе представлена полная и точная информация по теме. Описаны некоторые требования к объектам по тематике работы, не полностью отражена информация, в работе имеются ошибки, не имеющие принципиального значения.	Удовлетворительно	Освоена (базовый)
			В докладе не представлена информация по теме.	Неудовлетворительно	Не освоена
	Контрольная Работа, опрос, экзамен	Результат контрольной работы	Более 75 % правильных ответов	Отлично	Освоена (повышенный)
			60-75 % правильных ответов	Хорошо	Освоена (повышенный)
			50-60 % правильных ответов	Удовлетворительно	Освоена (базовый)
			Менее 50 % правильных ответов	Неудовлетворительно	Не освоена