

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Ганеев Винер Валиахметович  
Должность: Директор  
Дата подписания: 24.10.2023 14:58:56  
Уникальный программный ключ:  
fceab25d7092f3bff743e8ad3f8d57fddc1f5e66

ФГБОУ ВО «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»  
БИРСКИЙ ФИЛИАЛ УУНиТ  
ФАКУЛЬТЕТ БИОЛОГИИ И ХИМИИ

Утверждено:  
на заседании кафедры биологии, экологии и химии  
протокол № от 24.10.2023 г.  
Зав. кафедрой подписано ЭЦП/

Согласовано:  
Председатель УМК  
факультета биологии и химии  
подписано ЭЦП /

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)  
для очно-заочной формы обучения**

Квантовая механика и квантовая химия  
*Обязательная часть*

**программа бакалавриата**

Направление подготовки (специальность)  
04.03.01 *Химия ВО*

Направленность (профиль) подготовки  
Нефтехимия и химическая технология

Квалификация  
Бакалавр

Разработчик (составитель) <u>Доцент, к. х.н., доцент</u> (должность, ученая степень, ученое звание)	<u>подписано ЭЦП /Газетдинов Р.Р.</u> (подпись, Фамилия И.О.)
---	--

Для приема: 2020-2021 г.

Бирск г.

Составитель / составители: Газетдинов Р.Р.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры биологии, экологии и химии протокол № \_\_\_\_ от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры \_\_\_\_\_, протокол № \_\_\_\_ от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20 \_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ Ф.И.О/

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры \_\_\_\_\_, протокол № \_\_\_\_ от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20 \_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ Ф.И.О/

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры \_\_\_\_\_, протокол № \_\_\_\_ от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20 \_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ Ф.И.О/

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры \_\_\_\_\_, протокол № \_\_\_\_ от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20 \_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ Ф.И.О/

## Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций.....	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы.....	5
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся).....	5
4. Фонд оценочных средств по дисциплине .....	11
4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.....	11
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.....	13
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины .....	21
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.....	21
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины.....	22
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	22

**1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций**

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
Общепрофессиональные навыки	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники (ОПК-3);	ОПК-3.1. Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
		ОПК-3.2. Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
		ОПК-3.3. Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

## **2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия» относится к обязательной части.

Дисциплина изучается на 2,3 курсе в 4,5 семестре.

Цель изучения дисциплины: знание основ квантовой химии необходимо для формирования научного мировоззрения и плодотворной деятельности химиков для скорейшего и эффективного использования достижений науки. Изучение теоретических вопросов программы дополнено выполнением лабораторных работ, развивающих у студентов необходимые умения и навыки работы в расчетных программах.

## **3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)**

ФГБОУ ВО «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»  
БИРСКИЙ ФИЛИАЛ УУНиТ  
ФАКУЛЬТЕТ БИОЛОГИИ И ХИМИИ

**СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ**

дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» на 4,5 семестр

очно-заочная

форма обучения

<b>Вид работы</b>	<b>Объем дисциплины</b>
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	5/180
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	109.9
лекций	36
практических/ семинарских	72
лабораторных	0
контроль самостоятельной работы (КСР)	0
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) ФКР	1.9
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СРС)	35.3
Учебных часов на подготовку к экзамену, зачету (Контроль)	34.8

Форма контроля:

Зачет 4 семестр

Экзамен 5 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)						Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		Лек	П	Зч	Эк	Ко Р	СР С			
2 курс / 4 семестр										
1	Основы квантовой механики и квантовой химии.									
1.1	Основные этапы развития квантовой теории.  Предмет квантовой механики. Место квантовой механики среди других наук о движении. Основные этапы развития квантовой теории.	2	6				2.3	Осн. лит-ра №№ 1,2	Тестирование	Тестирование, Практические работы
1.2	Основные понятия квантовой механики.  Принцип неопределенности. Волновая функция. Операторы. Операторы основных физических величин. Коммутация операторов и обобщенное выражение соотношения неопределенностей Гейзенберга. Постулаты квантовой механики.	4	6				3	Осн. лит-ра №№ 1,2	Тестирование	Тестирование, Практические работы
2	Математический аппарат квантовой									

	механики.									
2.1	Некоторые примеры решения уравнения Шредингера.  Одномерное движение свободной частицы. Трехмерное движение свободной частицы. Движение частицы в одномерной потенциальной яме. Одномерный потенциальный барьер. Линейный гармонический осциллятор.	4	8				4	Осн. лит-ра №№ 1,2	Тестирование	Практические работы, Тестирование
2.2	Решение уравнения Шредингера для атома водорода (и водородоподобных атомов).  Уравнение Шредингера для атома водорода. Разделение переменных. Решение Ф-уравнения. Решение О-уравнения. Полиномы Лежандра. Решение R-уравнения. Полиномы Лягерра.	4	8				4	Осн. лит-ра №№ 1,2	Тестирование	Практические работы, Тестирование
2.3	Атомные орбитали. Квантовые числа.  Классификация атомных орбиталей. Пространственная структура атомных орбиталей. Энергия атомных орбиталей. Расстояние между электроном и ядром. Спектр водородоподобного атома. Главное квантовое число. Угловые моменты атома. Орбитальное квантовое число. Магнитное квантовое число. Спин электрона.	4	8				4	Осн. лит-ра №№ 1,2	Тестирование	Тестирование, Практические работы



3	Контрольная работа					1	0.5			
4	Зачет			1			0.2			
Итого по 2 курсу 4 семестру		18	36	1		1	18			
3 курс / 5 семестр										
1	Основные положения и методы квантовой химии									
1.1	<p>Многоэлектронные атомы.</p> <p>Атом гелия. Вариационный принцип. Вариационный метод Ритца. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока. Определитель Слэтера. Метод Хартри-Фока. Теорема Купманса. Энергетические уровни. Периодическая система элементов. Потенциалы ионизации атомов. Квантовые числа многоэлектронного атома. Спектры многоэлектронных атомов.</p>	6	12				6	Осн. лит-ра №№ 1,2 Доп. лит-ра № 1	Тестирование	Практические работы, Тестирование
1.2	<p>Теория химической связи.</p> <p>Приближение Борна-Оппенгеймера. Атомные единицы измерения. Метод молекулярных орбиталей (МО). Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (МО ЛКАО). Уравнения Рутаана.</p>	6	12				6	Осн. лит-ра №№ 1,2 Доп. лит-ра № 1	Тестирование	Тестирование, Практические работы

1.3	Программное обеспечение расчетов по методу MO.  Программы для выполнения квантово-химических расчетов. Алгоритм работы программ. Программы-интерпретаторы результатов квантово-химических расчетов. Программа HyperChem.	6	12				6	Доп. лит-ра № 1	Тестирование	Тестирование, Практические работы
2	Экзамен				1		36			
Итого по 3 курсу 5 семестру		18	36		1		54			
Итого по дисциплине		36	72	1	1	1	72			

#### 4. Фонд оценочных средств по дисциплине

##### 4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и формулировка компетенции: Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники (ОПК-3);

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения (Зачет)	
		Незачтено	Зачтено
ОПК-3.1. Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Не удовлетворительно знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Хорошо знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
ОПК-3.2. Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Не удовлетворительно уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Хорошо уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
ОПК-3.3. Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения	Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств	Не удовлетворительно владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Хорошо владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием

свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники		современной вычислительной техники
---	---	--	------------------------------------

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения (Экзамен)			
		2 (Неудовлетворительно)	3 (Удовлетворительно)	4 (Хорошо)	5 (Отлично)
ОПК-3.1. Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Не удовлетворительно знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Удовлетворительно знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Хорошо знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Отлично знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
ОПК-3.2. Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Не удовлетворительно уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Удовлетворительно уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Хорошо уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Отлично уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
ОПК-3.3. Владеть навыками применения	Владеть навыками применения расчетно-	Не удовлетворительно владеть навыками	Удовлетворительно владеть навыками применения	Хорошо владеть навыками применения	Отлично владеть навыками применения

расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
---	--	--	---	---	---

**4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.**

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ОПК-3.1. Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	(1-12, 14, 16-24, 26-28, 30-32, 39-47, 49-59, 61-109, 111-114, 116-118, 120-126, 128-137, 139, 141-150, 152-171, 173-183, 185-186, 188, 190-191, 193-202, 204-205, 207-208, 211-214, 216-217, 219-221, 225-227, 231-236, 239-242)
ОПК-3.2. Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	(13, 15, 25, 29, 33-38, 48, 60, 110, 115, 119, 127, 138, 140, 151, 172, 184, 187, 189, 192, 203, 206, 215, 218, 222-224, 228-230, 237-238.), Контрольная работа, Практические работы
ОПК-3.3. Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Контрольная работа, Практические работы, (13, 15, 25, 29, 33-38, 48, 60, 110, 115, 119, 127, 138, 140, 151, 172, 184, 187, 189, 192, 203, 206, 215, 218, 222-224, 228-230, 237-238.)

**Тестовые задания**

Описание тестовых заданий: тестовые задания включают тесты закрытого типа (с одним правильным ответом), тесты на установлении последовательности и на установление

соответствия. Оценка за выполнение тестовых заданий выставляется на основании процента заданий, выполненных студентами в процессе прохождения промежуточного и рубежного контроля знаний

(1-12, 14, 16-24, 26-28, 30-32, 39-47, 49-59, 61-109, 111-114, 116-118, 120-126, 128-137, 139, 141-150, 152-171, 173-183, 185-186, 188, 190-191, 193-202, 204-205, 207-208, 211-214, 216-217, 219-221, 225-227, 231-236, 239-242)

1. Как называется физическая теория, устанавливающая способ описания и законы движения микрочастиц (элементарных частиц, атомов, молекул, атомных ядер) и их систем (например, кристаллов), а также связь величин, характеризующих частицы и системы, с физическими величинами, непосредственно измеряемыми на опыте ...

+: квантовая механика

2. Ядро атома состоит из ...

-: электронов и нейтронов

+: нейтронов и протонов

-:  $\gamma$ -квантов

-: электронов, нейтронов и протонов

3. Чему противоречила планетарная модель атома?

+: Классической механике Ньютона

+: Электродинамике Максвелла

-: Квантовой механике

-: Квантовой хромодинамике

4. Соотношение между классической и квантовой механикой определяется существованием универсальной мировой постоянной, называемой ...

+: постоянная Планка

5. Как называется основная константа квантовой механики?

-: Постоянная Неймана

+: Постоянная Планка

-: Постоянная Гейзенберга

-: Постоянная Больцмана

(13, 15, 25, 29, 33-38, 48, 60, 110, 115, 119, 127, 138, 140, 151, 172, 184, 187, 189, 192, 203, 206, 215, 218, 222-224, 228-230, 237-238.)

60. Выберите соответствие для радиальных функций

1. 1: с (n=1, l=0), (n=2, l=1), (n=3, l=2)

2. 2: с (n=2, l=0), (n=3, l=1)

L3: с (n=3, l=0)

R1: не имеют узловых точек

R2: имеют одну узловую точку

R3: две узловые точки

115. Используя приведенные правила соотнесите вклад в значения константы экранирования  $S_{\text{экр}}$ :

L1: Для любых электронов, находящихся на внешних орбиталях по отношению к рассматриваемому, вклад  $S_{\text{экр}}$  равен

L2: Для каждого электрона этой же группы (кроме рассматриваемого) вклад равен #, кроме электронов 1S группы, для которых вклад равен #

L3: Для s, p- электронов вклад от всех электронов n-1 равен #, с n-2 оболочки и далее равен #

L4: Для d- и f-электронов внутренних групп ( в том числе s- и p-электронов этой же оболочки) в  $S_{\text{экр}}$ : равен #

R1: 0

R2: 0,35 и 0,30

R3: 0,85 и 1,00

R4: 1,00

238. Установите соответствие между названиями программ-интерпретаторов и их назначением:

R1: ChemCraft

R2: ViewMol3D

R3: Molekel

R4: GaussView

L1: сочетает в себе как классические графические инструменты для подготовки исходной структуры, так и широкие возможности визуализации результатов расчетов программ GAMESS и Gaussian94-Gaussian03

L2: Windows-ориентированная программа, предназначенная для визуализации квантово-химических расчетов

L3: эта программа совмещает в себе функции как создания анимации частот валентных колебаний, рендеринг молекулярных орбиталей, так и возможности выполнения квантово-химических расчетов

L4: является средством интерпретации результатов квантово-химических расчетов, выполненных в программах семейства Gaussian

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания выполнения тестовых заданий

Описание методики оценивания выполнения тестовых заданий: оценка за выполнение тестовых заданий ставится на основании подсчета процента правильно выполненных тестовых заданий.

**Критерии оценки (в баллах):**

- **9-10** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 81 – 100 %;

- **7-8** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 61 – 80 %;

- **4-6** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 41 – 60 %;

- **до 4** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 40 %;

### Контрольная работа

#### 1. Построить заданную структуру молекулы в программе HyperChem:

1. Толуол
2. Фенол
3. п-нитротолуол
4. о-нитротолуол
5. м-нитротолуол
6. п-ксилол
7. о-ксилол
8. п-крезол
9. м-крезол
10. о-крезол
11. Ацетофенон

#### 2. Выполнить оптимизацию геометрии молекулы методами молекулярной механики.

Для этого:

- курсор мыши устанавливают на пункт меню "Setup", щелчком по левой кнопке разворачивают меню и выбирают метод молекулярной механики (ММ) ("Molecular Mechanics"); в раскрывшемся окошечке устанавливают "ММ+" и щелкают по кнопке "ОК"
- запускают процесс оптимизации геометрии путем выбора пункта меню "Compute", которое разворачивают щелчком по левой кнопке мыши, далее выбирают "Geometry Optimize"; в раскрывшемся окошечке щелкают по кнопке "ОК"
- процесс оптимизации заканчивается, когда в нижней строке окна появляется надпись "Converged=YES"

### **3. Выполнить расчет молекулы полуэмпирическим квантово-химическим методом.**

Прежде чем запустить процесс оптимизации геометрии молекулы полуэмпирическим методом, целесообразно определить геометрические характеристики (длины связей и валентные углы) симметрично независимой части молекулы, полученные в ходе ММ оптимизации. Для этого выбирают курсор в виде двух концентрических окружностей, ставят этот курсор на один из интересующих атомов, нажимают левую кнопку мыши и, не отпуская ее, подводят курсор к следующему атому (для измерения длины связи) или к атому, находящемуся через один от исходного (для измерения величины валентного угла); затем кнопку отпускают. В нижней строке экрана появится значение длины связи (Е) или валентного угла (град.).

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания выполнения контрольной работы

Описание методики оценивания: при оценке выполнения студентом контрольной работы максимальное внимание следует уделять следующим аспектам: насколько полно в теоретическом вопросе раскрыто содержание материала, четко и правильно даны определения, раскрыто содержание понятий; верно использованы научные термины; демонстрируются высокий уровень умения оперировать научными категориями, анализировать информацию, владение навыками практической деятельности; кейс-задание решено на высоком уровне, содержит аргументацию и пояснения.

#### **Критерии оценки (в баллах):**

- **9-10** баллов выставляется студенту, если в теоретическом вопросе полно раскрыто содержание материала; четко и правильно даны определения, раскрыто содержание понятий; верно использованы научные термины; демонстрируются высокий уровень умения оперировать научными категориями, анализировать информацию, владение навыками практической деятельности; кейс-задание решено на высоком уровне, содержит пояснения; тестовые задания решены свыше, чем на 80%; уровень знаний, умений, владений – высокий;
- **7-8** баллов выставляется студенту, если в теоретическом вопросе раскрыто основное содержание материала; в основном правильно даны определения понятий и использованы научные термины; ответ самостоятельный; определения понятий неполные, допущены незначительные нарушения в последовательности изложения; небольшие недостатки при использовании научных терминов; кейс-задание решено верно, но решение не доведено до завершающего этапа; тесты решены на 60-80%. Уровень знаний, умений, владений – средний;
- **5-6** баллов выставляется студенту, если в теоретическом вопросе усвоено основное, но непоследовательно; определения понятий недостаточно четкие; не использованы в качестве доказательства выводы и обобщения из наблюдений, практических занятий; уровень умения оперировать научными категориями, анализировать информацию, владения навыками практической деятельности невысокий, наблюдаются пробелы и неточности; в решение кейс-задания верно выполнены некоторые этапы; тесты решены на 40-60%; уровень знаний, умений, владений – удовлетворительный;
- **менее 5** баллов выставляется студенту, если в теоретическом вопросе не изложено основное содержание учебного материала, изложение фрагментарное, не последовательное; определения понятий не четкие; не использованы в качестве доказательства выводы и обобщения из наблюдений, уровень умения оперировать научными категориями, анализировать информацию,



владения навыками практической деятельности очень низкий; тесты решены менее, чем на 40 %; уровень знаний, умений, владений – недостаточный.

## Практические работы

Практические работы, являются важным источником познания нового материала, способствуют формированию и совершенствованию практических умений и навыков обучающихся.

### Полуэмпирические методы квантовой химии

#### Выполнение работы.

#### **Построить заданную структуру молекулы в программе HyperChem:**

1. Тoluол
2. Фенол
3. п-нитротолуол
4. о-нитротолуол
5. м-нитротолуол

#### **1. Выполнить оптимизацию геометрии молекулы методами молекулярной механики.**

Для этого:

- курсор мыши устанавливают на пункт меню "Setup", щелчком по левой кнопке разворачивают меню и выбирают метод молекулярной механики (ММ) ("Molecular Mechanics"); в раскрывшемся окошечке устанавливают "ММ+" и щелкают по кнопке "ОК"
- запускают процесс оптимизации геометрии путем выбора пункта меню "Compute", которое разворачивают щелчком по левой кнопке мыши, далее выбирают "Geometry Optimize"; в раскрывшемся окошечке щелкают по кнопке "ОК"
- процесс оптимизации заканчивается, когда в нижней строке окна появляется надпись "Converged=YES"

#### **2. Выполнить расчет молекулы полуэмпирическим квантово-химическим методом.**

Прежде чем запустить процесс оптимизации геометрии молекулы полуэмпирическим методом, целесообразно определить геометрические характеристики (длины связей и валентные углы) симметрично независимой части молекулы, полученные в ходе ММ оптимизации. Для этого выбирают курсор в виде двух концентрических окружностей, ставят этот курсор на один из интересующих атомов, нажимают левую кнопку мыши и, не отпуская ее, подводят курсор к следующему атому (для измерения длины связи) или к атому, находящемуся через один от исходного (для измерения величины валентного угла); затем кнопку отпускают. В нижней строке экрана появится значение длины связи (Е) или валентного угла (град.).

Далее можно проводить расчет методом MNDO с оптимизацией геометрии. Для этого:

- курсор мыши устанавливают на пункт меню "File", щелчком по левой кнопке разворачивают меню и выбирают "Start Log" (создание файла отчета); файлу дают название и устанавливают "Quantum print level" = 9
- курсор мыши устанавливают на пункт меню "Setup", щелчком по левой кнопке разворачивают меню и выбирают "Semiempirical methods"; в раскрывшемся окошечке устанавливают "MNDO"
- щелкают по кнопке "options" и устанавливают соответствующий заряд и мультиплетность в соответствующих полях и щелкают по кнопке "ОК"
- еще раз щелкают по кнопке "ОК"
- запускают процесс расчета с оптимизацией геометрии путем выбора пункта меню "Compute", которое разворачивают щелчком по левой кнопке мыши, и далее выбирают "Geometry Optimize"; в раскрывшемся окошечке щелкают по кнопке "ОК"
- расчет заканчивается, когда в нижней строке окна появляется надпись "Conv=YES"
- закрывают файл отчета (.log file) путем выбора пункта меню "File", которое разворачивают щелчком по левой кнопке мыши, и далее выбирают "Stop Log".

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания выполнения практических работ

Описание методики оценивания выполнения практических работ: оценка за выполнение тестовых заданий ставится на основании знания теоретического материала по теме практической работы, умений и навыков применения знаний на практике, работы с оборудованием, анализировать результаты практической работы.

**Критерии оценки (в баллах):**

- **5** баллов выставляется студенту, если демонстрируются знания темы, цели и задач практической работы, хода работы, применяемых методик исследования; демонстрируется полное знание теоретического материала по теме практической работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются умения и навыки работы с оборудованием, применения знания на практике, анализа результатов практической работы и формулирование выводов, владение навыками прикладной деятельности;
- **4** балла выставляется студенту, если демонстрируются знания темы, цели и задач практической работы, хода работы, имеются пробелы в знании применяемых методик исследования; демонстрируется неполное знание фактического материала по теме практической работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются некоторые недостатки умения работать с оборудованием, применять знания на практике, недостатки владения навыками прикладной деятельности и способности анализировать результаты практической работы, формулировать выводы, проследить причинно-следственные связи;
- **3** балла выставляется студенту, если демонстрируются неполные знания цели и задач практической работы, хода работы, применяемых методик исследования; демонстрируется неполное, несистемное знание теоретического материала по теме практической работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются заметные недостатки в умении работать с оборудованием, применять знания на практике, недостаточно владеет навыками прикладной деятельности, способностью анализировать результаты практической работы и формулировать выводы, проследить причинно-следственные связи;
- **0-2** балла выставляется студенту, если демонстрируются полное или почти полное отсутствие знания цели и задач практической работы, хода работы, применяемых методик исследования; демонстрируется полное или почти полное отсутствие знания теоретического материала по теме практической работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются значительные недостатки умения работать с оборудованием, применять знания на практике, владения навыками прикладной деятельности, способности анализировать результаты практической работы и формулировать выводы, проследить причинно-следственные связи.

**Зачет**

Зачет является оценочным средством для всех этапов освоения компетенций.

Примерные вопросы к зачету, 2 курс / 4 семестр

1. Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции в развитии квантовой химии.
2. Основные понятия квантовой механики. Волны Де Бройля, проверка гипотезы Де Бройля.
3. Основные понятия квантовой механики. Линейный гармонический осциллятор.
4. Основные понятия квантовой механики. Вращательное движение микрочастиц.
5. Основные понятия квантовой механики. Принцип неопределенности.
6. Основные понятия квантовой механики. Волновая функция.
7. Основные понятия квантовой механики. Операторы, их свойства, коммутация.
8. Математический аппарат квантовой механики. Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения.
9. Математический аппарат квантовой механики. Оператор Гамильтона.
10. Постулаты квантовой механики.

11. Уравнение Шредингера.
12. Примеры решения уравнения Шредингера.
13. Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома и водорода.
14. Атомные орбитали.
15. Свойства водородоподобного атома.
16. Квантовые числа.
17. Вариационный принцип. Вариационный метод Ритца.
18. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока. Определитель Слейтера.
19. Свойства многоэлектронных атомов. Энергетические уровни. Периодическая система. Свойства элементов.
20. Квантовые числа многоэлектронных атомов. Спектры многоэлектронных атомов.

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания зачета

Зачет выставляется по рейтингу, в зависимости от эффективности работы в процессе изучения дисциплины, что определяется количеством набранных баллов за все виды заданий текущего и рубежного контроля

**зачтено** – от 60 до 110 баллов

**не зачтено** – от 0 до 59 баллов.

### Экзаменационные билеты

Экзамен (зачет) является оценочным средством для всех этапов освоения компетенций. Структура экзаменационного билета: в билете указывается кафедра в рамках нагрузки которой реализуется данная дисциплина, форма обучения, направление и профиль подготовки, дата утверждения; билет может включать в себя теоретический(ие) вопрос(ы) и практическое задание (кейс-задание).

Примерные вопросы к экзамену, 3 курс / 5 семестр

1. Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной химической науки.
2. Основные постулаты квантовой механики. Квантовые состояния и волновые функции; основные свойства волновых функций.
3. Операторы физических величин (наблюдаемых); средние значения и дисперсии наблюдаемых. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве.
4. Математический аппарат квантовой механики. Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения. Вырождение.
5. Матричное представление операторов. Разложение по собственным функциям эрмитова оператора. Коммутационные соотношения.
6. Операторы координат, импульсов, моментов импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Соотношения неопределенностей. Физический смысл и простейшие оценки на их основе.
7. Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера. Дискретный и непрерывный спектры. Уравнение непрерывности.
8. Простейшие примеры применения квантовой механики. Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций.
9. Задачи о прямоугольном потенциальном ящике, потенциальном барьере и гармоническом осцилляторе.
10. Теория момента импульса. Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса. Правила сложения моментов импульса. Жесткий ротатор.
11. Задача об атоме водорода. Разделение переменных. Водородоподобные орбитали, графическое представление их радиальных и угловых частей. Вырождение одноэлектронных состояний как следствие симметрии центрального поля.

12. Приближенные методы решения квантовомеханических задач. Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие и при наличии вырождения. Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод. Метод Ритца.
13. Молекула в постоянных электрическом и магнитном полях. Дипольный электрический и магнитный моменты системы частиц. Снятие вырождения под влиянием постоянного электрического или магнитного поля (эффекты Штарка и Зеемана.)
14. Спин элементарных частиц и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления.
15. Квантовая система в переменном электромагнитном поле. Временная теория возмущений. Переходы под влиянием излучения и правила отбора. Коэффициенты Эйнштейна.
16. Системы тождественных частиц: фермионы и бозоны. Антисимметричность волновой функции для системы электронов. Представление волновой функции системы электронов в виде определителя.
17. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.
18. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри - Фока (самосогласованного поля, ССП).
19. Уравнения, определяющие орбитали. Орбитальные энергии и их связь с полной электронной энергией.
20. Понятие о методе конфигурационного взаимодействия. Метод валентных схем. Электронное строение атомов. Электронные конфигурации и термы атомов. Сложение моментов для атомов. Правила Хунда. Электронное строение атомов и периодическая система элементов Д.И. Менделеева.
21. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слэтеровского и гауссова типа. Метод ССП МО ЛКАО.
22. Симметрия и свойства молекул. Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии.  $\sigma$ - и  $\pi$ -орбитали.  $\pi$ -электронное приближение. Орбитали симметрии и эквивалентные орбитали.
23. Связывающие и разрыхляющие орбитали. Локализованные молекулярные орбитали, натуральные связывающие орбитали и классические представления о химической связи.
24. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Наиболее распространенные программные комплексы (MOPAC, GAUSSIAN, Hyper Chem, Material Studio и др.).

Образец экзаменационного билета

<p>МИНОБРНАУКИ РФ          ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ          ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ          «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»          БИРСКИЙ ФИЛИАЛ УУНиТ          Кафедра биологии, экологии и химии</p>	
<p>Дисциплина: Квантовая механика и квантовая химия          очно-заочная форма обучения          3 курс 5 семестр</p>	<p>Курсовые экзамены 20__-20__ г.          Направление 04.03.01 Химия ВО          Профиль: Нефтехимия и химическая технология</p>
<p><b>Экзаменационный билет № 1</b></p> <p>1. Основные постулаты квантовой механики. Квантовые состояния и волновые функции; основные свойства волновых функций.</p>	

2. Спин элементарных частиц и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления.

Дата утверждения: \_\_\_\_.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания ответа на экзамене

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины: текущий контроль – максимум 40 баллов; рубежный контроль – максимум 30 баллов, поощрительные баллы – максимум 10.

При оценке ответа на экзамене максимальное внимание должно уделяться тому, насколько полно раскрыто содержание материала, четко и правильно даны определения, раскрыто содержание понятий, верно ли использованы научные термины, насколько ответ самостоятельный, использованы ли ранее приобретенные знания, раскрыты ли причинно-следственные связи, насколько высокий уровень умения оперирования научными категориями, анализа информации, владения навыками практической деятельности.

**Критерии оценки (в баллах):**

- **25-30 баллов** выставляется студенту, если студент дал полные, развернутые ответы на все теоретические вопросы билета, продемонстрировал знание функциональных возможностей, терминологии, основных элементов, умение применять теоретические знания при выполнении практических заданий. Студент без затруднений ответил на все дополнительные вопросы. Практическая часть работы выполнена полностью без неточностей и ошибок;
- **17-24 баллов** выставляется студенту, если студент раскрыл в основном теоретические вопросы, однако допущены неточности в определении основных понятий. При ответе на дополнительные вопросы допущены небольшие неточности. При выполнении практической части работы допущены несущественные ошибки;
- **10-16 баллов** выставляется студенту, если при ответе на теоретические вопросы студентом допущено несколько существенных ошибок в толковании основных понятий. Логика и полнота ответа страдают заметными изъянами. Заметны пробелы в знании основных методов. Теоретические вопросы в целом изложены достаточно, но с пропусками материала. Имеются принципиальные ошибки в логике построения ответа на вопрос. Студент не решил задачу или при решении допущены грубые ошибки;
- **1-10 баллов** выставляется студенту, если ответ на теоретические вопросы свидетельствует о непонимании и крайне неполном знании основных понятий и методов. Обнаруживается отсутствие навыков применения теоретических знаний при выполнении практических заданий. Студент не смог ответить ни на один дополнительный вопрос.

Перевод оценки из 100-балльной в четырехбалльную производится следующим образом:

- отлично – от 80 до 110 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- хорошо – от 60 до 79 баллов;
- удовлетворительно – от 45 до 59 баллов;
- неудовлетворительно – менее 45 баллов.

**1. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

**5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины**

**Основная литература**

1. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по химич. спец. / В. И. Барановский .— М. : Академия, 2008 .— 383 с. — (Высшее профессиональное образование) .— ISBN 978-5-7695-3961-9 : 532 р.00 к.
2. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по химич. спец. / В. И. Барановский .— М. : Академия, 2008 .— 383 с. — (Высшее профессиональное образование) .— ISBN 978-5-7695-3961-9 : 532 р.00 к.

#### **Дополнительная литература**

1. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по химико-технологическим направ. и спец. / В. Г. Цирельсон .— М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010 .— 495 с.

#### **5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины**

1. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://elibrary.ru/>.
2. Электронная библиотечная система «Лань» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/>.
3. Университетская библиотека онлайн biblioclub.ru [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/>.
4. Электронная библиотека УУНиТ [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://elib.bashedu.ru/>.
5. Российская государственная библиотека [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.rsl.ru/>.
6. Национальная электронная библиотека [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://xn--90ax2c.xn--p1ai/viewers/>.
7. Национальная платформа открытого образования proed.ru [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://npoed.ru/>.
8. Электронное образование Республики Башкортостан [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://edu.bashkortostan.ru/>.
9. Информационно-правовой портал Гарант.ру [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.garant.ru/>.

#### **Программное обеспечение**

1. Office Professional Plus - Договор №0301100003620000022 от 29.06.2020, Договор № 2159-ПО/2021 от 15.06.2021, Договор №32110448500 от 30.07.2021
2. Windows - Договор №0301100003620000022 от 29.06.2020, Договор № 2159- ПО/2021 от 15.06.2021, Договор №32110448500 от 30.07.2021
3. Браузер Google Chrome - Бесплатная лицензия [https://www.google.com/intl/ru\\_ALL/chrome/privacy/eula\\_text.html](https://www.google.com/intl/ru_ALL/chrome/privacy/eula_text.html)
4. Браузер Яндекс - Бесплатная лицензия [https://yandex.ru/legal/browser\\_agreement/index.html](https://yandex.ru/legal/browser_agreement/index.html)
5. Справочно-правовая система «Гарант» - Договор №52 от 20.03.2019, Договор №35 от 23.03.2020, Договор №69 от 15 марта 2021, Договор 53 от 16.03.2022 Договор №31 от 16 марта 2023г.

#### **6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Наименование	Вид занятий	Наименование оборудования,
--------------	-------------	----------------------------

специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий		программного обеспечения
Аудитория 11(БФ)	Лекционная, Семинарская, Для консультаций, Для контроля и аттестации	Коммутатор d-link , источник бесперебойного питания арс, компьютеры в сборе, учебная мебель, доска. Программное обеспечение 1. Office Professional Plus
Аудитория 40(БФ)	Лекционная, Семинарская, Для консультаций, Для контроля и аттестации	Проектор aser, доска, учебная мебель, настенный экран.
Аудитория 42(БФ)	Для самостоятельной работы	Компьютеры в сборе, учебно-методические материалы, учебная мебель. Программное обеспечение 1. Office Professional Plus 2. Windows 3. Браузер Google Chrome 4. Браузер Яндекс
Читальный зал(ФМ)	Для самостоятельной работы	Ксерокс kyosera, принтер canon lbr 810, компьютеры в сборе, учебная мебель на 100 посадочных мест, учебно-методические материалы. Программное обеспечение 1. Office Professional Plus 2. Windows 3. Справочно-правовая система «Гарант»