Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ганеев Винер Валиахметович
Должность: Директор
Дата подписания: 28.10.2026 10:20:52
Уникальный программный ключ:
fceab25d7092f3bff743e8ad3f8d57fddc1f5e66

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий»

Бирский филиал

ФАКУЛЬТЕТ БИОЛОГИИ И ХИМИИ

УТВЕРЖДАЮ:
Декан
подписано ЭЦП Шмелев Н.А.
(подпись, инициалы, фамилия)

«26» 02 2026 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовая механика и квантовая химия
(наименование дисциплины)

ОПОП ВО программа бакалавриата
04.03.01 Химия
шифр и наименование направления подготовки (специальности)

направленность (профиль, специализация)

Нефтехимия и химическая технология
наименование направленности (профиля, специализации)

форма обучения
очная
(очная, очно-заочная, заочная)

Бирск 2026 г.

Рабочая программа составлена на основании учебного плана основной профессиональной образовательной программы 04.03.01 Химия профиль Нефтехимия и химическая технология, одобренного ученым советом Бирского филиала Уфимского университета науки и технологий (протокол №7 от 27.02.2026 г.) и утвержденного директором Бирского филиала 27.02.2026.

Зав.кафедрой кафедры биологии, экологии и химии *(наименование кафедры разработчика программы)*	*подписано ЭЦП*	Онина С.А.
Разработчик программы	*подписано ЭЦП*	Газетдинов Р.Р.
Руководитель образовательной программы	*подписано ЭЦП*	Онина С.А.

1. Цель дисциплины. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы

1.1. Цель дисциплины

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.

1.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы

Таблица 1. – Результаты обучения по дисциплине

Планируемые результаты освоения основной профессиональной образовательной программы (компетенции, закрепленные за дисциплиной)		Код и наименование индикатора достижения компетенции, закрепленного за дисциплиной
код компетенции	наименование компетенции	
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1. Использует современное программное обеспечение для расчета структурных, спектральных или термодинамических свойств веществ
		ОПК-3.2. Применяет расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
		ОПК-3.3. Использует расчетно-теоретические методы для решения химических и технологических задач с использованием современной вычислительной техники

2. Структура и трудоемкость дисциплины

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 5 зачетные единицы (з.е.), 180 академических часов.

Таблица 2 – Объем дисциплины

Виды учебной работы	Всего, часов	Количество часов в семестре
Общая трудоемкость дисциплины	180	4 семестр - 72 5 семестр - 108
Контактная работа обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий (всего)	108	4 семестр - 54 5 семестр - 54
в том числе:		
лекции	36	4 семестр - 18

Виды учебной работы	Всего, часов	Количество часов в семестре
		5 семестр - 18
лабораторные занятия	0	
практические занятия	72	4 семестр - 36 5 семестр - 36
Другие виды работ в соответствии с УП:		
контрольная работа	0	
консультации	1	5 семестр - 1
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	72	4 семестр - 18 5 семестр - 54
Из них:		
контроль	34.8	
ФКР:		
зачет	0.2	4 семестр - 1
зачет с оценкой	0	
курсовая работа (проект)	0	
экзамен	1.2	5 семестр - 1

3 Содержание дисциплины

Таблица 3 – Содержание дисциплины

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Виды деятельности					Форма текущего контроля успеваемости
		Лек, час.	П, час.	Зч, час.	Эк, час.	СРС, час.	
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	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	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	Тестирование, Практические работы
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	Тестирование, Практические работы
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	Тестирование, Практические работы
3	Контрольная работа					0.5	
4	Зачет			1		0.2	
Итого по 2 курсу 4 семестру		18	36	1		18	
3 курс / 5 семестр							
1	Основные положения и методы квантовой химии						
1.1	Многоэлектронные атомы. Атом гелия. Вариационный принцип. Вариационный метод Ритца. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока. Определитель Слэтера. Метод Хартри-Фока. Теорема Купманса. Энергетические уровни. Периодическая система элементов.	6	12			6	Тестирование, Практические работы

	Потенциалы ионизации атомов. Квантовые числа многоэлектронного атома. Спектры многоэлектронных атомов.						
1.2	Теория химической связи. Приближение Борна-Оппенгеймера. Атомные единицы измерения. Метод молекулярных орбиталей (МО). Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (МО ЛКАО). Уравнения Рутаана.	6	12			6	Тестирование, Практические работы
1.3	Программное обеспечение расчетов по методу МО. Программы для выполнения квантово-химических расчетов. Алгоритм работы программ. Программы-интерпретаторы результатов квантово-химических расчетов. Программа HyperChem.	6	12			6	Практические работы, Тестирование
2	Экзамен				1	36	
Итого по 3 курсу 5 семестру		18	36		1	54	
Итого по дисциплине		36	72	1	1	72	

Таблица 4 – Практические (семинарские) занятия

№ п/п	Наименование семинарских и практических работ	Объем, час.

4. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины. Баллы, выставляемые за конкретные виды деятельности представлены ниже.

Контрольные задания для проведения текущего контроля успеваемости

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
-: γ-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: c (n=1, l=0), (n=2, l=1), (n=3, l=2)
2. 2: c (n=2, l=0), (n=3, l=1)

L3: c (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 $S_{экр}$:
L1: Для любых электронов, находящихся на внешних орбиталях по отношению к рассматриваемому, вклад $S_{экр}$ 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 $S_{экр}$: 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 предназначением:
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 "OK"
- 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 "OK"
- 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. Толуол
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 "OK"
- 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 "OK"
- 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 "OK"
- еще раз щелкают по кнопке "OK"
- 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 "OK"
- 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, прослеживать 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, прослеживать 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, прослеживать 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. σ- и π-орбитали. π-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

<table>
<tr><td colspan="2">МИНОБРНАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»
БИРСКИЙ ФИЛИАЛ УУНиТ
Кафедра биологии, экологии и химии</td></tr>
<tr><td>Дисциплина: Квантовая механика и квантовая химия
очная форма обучения
3 курс 5 семестр</td><td>Курсовые экзамены 20__-20__ г.
Направление 04.03.01 Химия
Профиль: Нефтехимия и химическая технология</td></tr>
<tr><td colspan="2">Экзаменационный билет № 1
1. Основные постулаты квантовой механики. Квантовые состояния и волновые функции; основные свойства волновых функций.
2. Спин элементарных частиц и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления.</td></tr>
<tr><td>Дата утверждения: __.__._____</td><td>Заведующий кафедрой
_____</td></tr>
</table>

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 раскрыты 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.

Задания для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме:

4 семестр - зачет, 5 семестр - экзамен.

Проверяемыми на промежуточной аттестации элементами содержания являются темы дисциплины.

Для проверки *знаний* используются вопросы и задания в различных формах.

Умения, навыки (или опыт деятельности) и компетенции проверяются с помощью компетентностно-ориентированных задач (ситуационных, производственных или кейсового характера) и различного вида конструкторов.

Все задачи являются многоходовыми. Некоторые задачи, проверяющие уровень сформированности компетенций, являются многовариантными. Часть умений, навыков и компетенций прямо не отражена в формулировках задач, но они могут быть проявлены обучающимися при их решении.

В каждый вариант включаются задания по каждому проверяемому элементу содержания во всех перечисленных выше формах и разного уровня сложности. Такой формат позволяет объективно определить качество освоения обучающимися основных элементов содержания дисциплины и уровень сформированности компетенций.

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине при использовании модульно-рейтинговой системы

Критериями оценивания при модульно-рейтинговой системе являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины:

для экзамена: текущий контроль – максимум 40 баллов; рубежный контроль – максимум 30 баллов, поощрительные баллы – максимум 10.

для зачета: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10.

Шкалы оценивания:

для экзамена:

от 45 до 59 баллов – «удовлетворительно»;

от 60 до 79 баллов – «хорошо»;

от 80 баллов – «отлично».

для зачета:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),

не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов.

Рейтинг-план дисциплины

Таблица перевода баллов текущего контроля в баллы рейтинга

	5	**5**	**5**	**5**	**5**	**5**	**5**	**5**	**5**	**5**
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	5	3	2	2	1	1	1	1	1	1
2		5	4	3	2	2	2	2	2	1
3			5	4	3	3	3	2	2	2
4				5	4	4	3	3	3	2
5					5	5	4	4	3	3
6						5	5	4	4	3
7							5	5	4	4
8								5	5	4
9									5	5
10										5

Рейтинг-план дисциплины представлен в Приложении 1.

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

5.1. Основная учебная 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.

5.2. Дополнительная учебная 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.

5.3. Другие учебно-методические материалы

6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

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 npoed.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. LIBREOFFICE - Договор №0301400003023000002 от 14.03.2023 (бессрочный)
2. Операционная система Astra Linux - Договор 0301400003023000002 от 14 марта 2023 бессрочно
3. ACD/ChemSketch - Бесплатная лицензия https://www.acdlabs.com/solutions/academia/
4. Справочная Правовая Система "КонсультантПлюс" - Договор №125818-С от 28.04.2026
5. Программа для обработки ямр спектров SpinWorks - Бесплатная лицензия https://fen.nsu.ru/nmr/index.php?option=com_content&view=article&id=3&Itemid=4

7. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий	Вид занятий	Наименование оборудования, программного обеспечения
Аудитория 11(БФ)	Лекционная, Семинарская, Для консультаций, Для контроля и аттестации	Ибп, коммутатор, компьютер, мебель (столы для коворкинг зоны). Программное обеспечение 1. LIBREOFFICE 2. ACD/ChemSketch 3. Операционная система Astra Linux 4. Программа для обработки ямр спектров SpinWorks
Аудитория 21(БФ)	Для хранения оборудования	Мебель.
Аудитория 23(БФ)	Лекционная, Семинарская, Для консультаций, Для контроля и аттестации	Доска, мебель, медицинская аптечка, проектор, средства пожаротушения, учебно-методическая литература,

		учебно-наглядные коллекции, учебно-наглядные пососбия, учебный набор, химическая посуда, шкаф вытяжной.
Аудитория 34(БФ)	Для консультаций	Компьютер, мебель, монитор, мфу. Программное обеспечение 1. LIBREOFFICE 2. Операционная система Astra Linux
Читальный зал(ФМ)	Для самостоятельной работы	Компьютер, ксерокс, мебель, принтер, учебно-методические материалы. Программное обеспечение 1. LIBREOFFICE 2. Операционная система Astra Linux 3. Справочная Правовая Система "КонсультантПлюс"