



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Дальневосточный федеральный университет»  
(ДФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

«СОГЛАСОВАНО»

Руководитель ОП

(подпись)

«18» сентября 2017 г.

Ширмовский С.Э.  
(Ф.И.О. рук.ОП)

«УТВЕРЖДАЮ»

Заведующий кафедрой теоретической и  
ядерной физики



(подпись)

«18» сентября 2017 г.

Ширмовский С.Э.  
(Ф.И.О. зав. каф.)

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Квантовая химия

Направление подготовки 03.03.02 Физика

Форма подготовки очная

курс 4 семестр 7  
лекции 36 (час.)  
практические занятия 54 (час.)  
лабораторные работы 0 час.  
в числе с использованием МАО лек. 0 /пр. 18 /лаб. 0 час.  
всего часов аудиторной нагрузки 90 (час.)  
в том числе с использованием МАО 18 час.  
самостоятельная работа 54 (час.)  
курсовая работа / курсовой проект не предусмотрен  
зачет 7 семестр  
экзамен 7 семестр

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями образовательного стандарта, самостоятельно установленного ДВФУ, утвержденного приказом ректора от 07.07.2015 № 1282.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры теоретической и ядерной физики, протокол № 1 от «18» сентября 2017 г.

Заведующий кафедрой: Ширмовский С.Э. к.ф.-м. н., доцент

Составитель (ли): Ширмовский С.Э. к.ф.-м. н., доцент

## Оборотная сторона титульного листа РПУД

### I. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г. № \_\_\_\_\_

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(подпись) (И.О. Фамилия)

### II. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г. № \_\_\_\_\_

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(подпись) (И.О. Фамилия)

## ABSTRACT

**Bachelor's degree in 03.03.02 "Physics".**

**Course title:** Quantum chemistry

**Variable part of Block 4 credits.**

**Instructor:**

**At the beginning of the course a student should be able to:**

To successfully master the "Quantum Chemistry" discipline, students should know the theoretical foundations of chemistry (composition, structure and chemical properties of basic simple substances and chemical compounds, the relationship between the structure of matter and the flow of chemical processes), the fundamental sections of mathematics (linear algebra, mathematical analysis, differential equations, probability theory), fundamental branches of physics (mechanics, molecular physics and thermodynamics, electrodynamics, atomic physics, fundamentals of quantum mechanics). Students should be able to use theoretical knowledge to analyze the basic problems of quantum chemistry, use computer software for planning quantum chemical studies, and analysis of calculated data.

**Learning outcomes:**

the ability to use in professional activities basic scientific knowledge, including knowledge about the subject and objects of study, research methods, modern concepts, achievements and limitations of the natural sciences (primarily chemistry, biology, ecology, earth and human sciences);

the ability to understand and present the information received and present the results of physical research;

ability to use specialized knowledge in the field of physics for the development of specialized physical disciplines;

**Course description:**

The objectives of the development of the discipline "Quantum Chemistry" are:

- ensuring the training of specialists in the field of theoretical and computational methods of modern chemistry,
- the formation of a holistic natural science outlook among specialists,
- acquaintance with the basic concepts and definitions of quantum mechanics, as well as with the current state of quantum chemistry.

Tasks:

- mastering the fundamental principles and methods for solving scientific and practical problems;

- formation of skills in the application of fundamental science applications to a competent scientific analysis of situations that a specialist will have to face when creating or using new technologies;
- mastering the main theories, allowing to describe the phenomena in nature, and the limits of applicability of these theories for solving current and future professional tasks;
- the formation of students of the basics of the natural science picture of the world

**Main course literature:**

1. Stepanov N.F. Quantum mechanics and quantum chemistry. M.: Mir, 2001. 519 p.
2. Baranovsky V.I. Quantum mechanics and quantum chemistry. M.: Academy, 2008. 383 p.
3. Minkin V.I., Simkin B.Ya., Minyaev R.M. The theory of the structure of molecules. Rostov-on-Don.: Phoenix, 1997. 558 p.
4. Khursan S.L. Quantum mechanics and quantum chemistry. Lecture course. Ufa: Bashkir State University Publishing House, 2005. 164 p.
5. Gribov, L.A., Mushtakova, S.P. Quantum chemistry: Textbook. M.: Gardariki, 1999. 390 p.
6. Melèshina A.M. The course of quantum mechanics for chemists: Proc. allowance. 2nd ed., Pererab. And add. M.: Higher. school., 1980. 215 p.
7. Flarry R. Quantum chemistry. M.: Mir, 1985. 472 p.
8. Zagradnik R., Polak R. Basics of Quantum Chemistry. M.: Mir, 1979. 504 p.
9. Melèshina A.M. The course of quantum chemistry: Textbook. allowance. Voronezh: Voronezh publishing house. Un-ta, 1981. 198 p.
10. Minkin V.I., Simkin B.Ya., Minyaev R.M. The theory of the structure of molecules. M.: Higher. shk., 1979. 407 with.

**Form of final control:** test, exam

## АННОТАЦИЯ

Рабочая программа дисциплины «Квантовая химия» разработана для студентов 4 курса направления 03.03.02 «Физика», специализации «Физика» в соответствии с требованиями ОС ВО ДВФУ по данному направлению.

Дисциплина «Квантовая химия» относится к разделу Б1.В.ДВ.5 дисциплин по выбору учебного плана.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часа. Учебным планом предусмотрены лекционные занятия (36 час.) и практические занятия (54 час), самостоятельная работа (54 час. в том числе на подготовку к экзамену 36 час). Дисциплина реализуется в 7 семестре 4 курса.

Содержание программы данной дисциплины базируется на знаниях, заложенных в полном школьном курсе математики, физики и химии, дисциплинах базовой части математического и естественнонаучного цикла: математика, физика, информатика, а также дисциплине «Общая химия», читаемых студентам первого и второго курсов.

Для успешного освоения дисциплины «Квантовая химия» студенты должны знать теоретические основы химии (состав, строение и химические свойства основных простых веществ и химических соединений, связь строения вещества и протекания химических процессов), фундаментальные разделы математики (линейную алгебру, математический анализ, дифференциальные уравнения, теорию вероятности), фундаментальные разделы физики (механику, молекулярную физику и термодинамику, электродинамику, атомную физику, основы квантовой механики). Студенты должны уметь использовать теоретические знания для анализа основных задач квантовой химии, использовать программное обеспечение компьютеров для планирования квантово-химических исследований, анализа расчетных данных.

**Целями** освоения дисциплины «Квантовая химия» являются:

- обеспечение подготовки специалистов в области теоретических и расчетных методов современной химии,
- формирование у специалистов целостного естественнонаучного мировоззрения,
- знакомство с основными понятиями и определениями квантовой механики, а также с современным состоянием квантовой химии.

**Задачи:**

- овладение фундаментальными принципами и методами решения научных и практических задач;

- формирование навыков по применению приложений фундаментальной науки к грамотному научному анализу ситуаций, с которыми специалисту придется сталкиваться при создании или использовании новых технологий;
- освоение основных теорий, позволяющих описать явления в природе, и пределов применимости этих теорий для решения современных и перспективных профессиональных задач;
- формирование у студентов основ естественнонаучной картины мира.

Для успешного изучения дисциплины «Квантовая химия» у обучающихся должны быть сформированы следующие предварительные компетенции:

- готовность к саморазвитию, повышению своей квалификации и мастерства (ОК-6);
- владение основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, иметь навыки работы с компьютером как средством управления информацией (ОК-10);

В результате изучения данной дисциплины у обучающихся формируются следующие общекультурные и общепрофессиональные компетенции (элементы компетенций).

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
ПК-6 способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	Знает	основные понятия, постулаты, приближенные методы решения уравнения Шредингера, результаты его решения для модельных задач квантовой химии; основные характеристики электронной структуры атомов и молекул; методику расчетов электронной структуры атомно-молекулярных систем; основные понятия и определения квантовой механики, а также с современное состояние квантовой химии. фундаментальные принципами и методами решения научных и практических задач;
	Умеет	применять теорию для классификации атомных и молекулярных состояний; рассчитывать молекулярные свойства химических систем; формулировать квантово-химическую задачу и решать ее с использованием соответствующих программ; выбирать базисные наборы и квантово-химические методы для расчета требуемых свойств

		различных химических систем; использовать основные законы квантовой химии в профессиональной деятельности
	Владеет	приемами и методами математического анализа и моделирования, теоретического исследования химических процессов; системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания; навыками работы с компьютерами в области квантово-химического моделирования химических процессов; навыками работы с типичными квантово-химическими программами, расчета и интерпретации характеристик электронного строения и свойств атомных и молекулярных систем.

Для формирования вышеуказанных компетенций в рамках дисциплины «Квантовая химия» предусмотрены следующие методы активного/интерактивного обучения: лекция-беседа; групповая консультация (для практических занятий).

## **I. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА**

**Лекционные занятия 36 час**

1. Введение. Предмет квантовой механики. Основные этапы развития квантовой теории. (2 час)
2. Основные понятия и постулаты квантовой механики. (2 час)
3. Простейшие модельные задачи квантовой механики. (2 час)
4. Решение уравнения Шредингера для водородоподобных атомов. Атомные орбитали. Квантовые числа. (2 час)
5. Вариационный метод. Многоэлектронные атомы и их свойства (4 час)
6. Теория химической связи. Метод МО ЛКАО. (4 час)
7. Базисные наборы атомных орбиталей. (2 час)
8. Электронная корреляция и методы ее учета. (4 час)
9. Теория функционала плотности. (4 час)
10. Полуэмпирические методы. (4 час)
11. Поверхность потенциальной энергии. (2 час)
12. Теория симметрии в квантовой химии. (2 час)

13. Программное обеспечение квантовой химии. (4 час)

## II. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

### Практические занятия (54 час.)

На практических занятиях предполагается решение задач по изучаемому курсу с целью закрепления знаний.

## III. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Квантовая химия» представлено в Приложении 1 и включает в себя:

план-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине, в том числе примерные нормы времени на выполнение по каждому заданию;

характеристика заданий для самостоятельной работы обучающихся и методические рекомендации по их выполнению;

требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы;

критерии оценки выполнения самостоятельной работы.

## IV. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций		Оценочные средства	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
1	Темы 1-13.	ПК-6	знает	Собеседование (УО-1)	Вопросы теста, контрольная работа, вопросы на зачет.
			умеет	Устный опрос (УО-1)	
			владеет	Тест (ПР-1)	

Типовые контрольные задания, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений и навыков и (или)



опыта деятельности, а также критерии и показатели, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, представлены в Приложении 2.

## **V. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **Основная литература:**

1. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001. 519 с.
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Академия, 2008. 383 с.
3. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону.: Феникс, 1997. 558 с.
4. Хурсан С.Л. Квантовая механика и квантовая химия. Курс лекций. Уфа: Изд-во БашГУ, 2005. 164 с.
5. Грибов Л.А., Муштакова С.П. Квантовая химия: Учебник. М.: Гардарики, 1999. 390 с.
6. Мелёшина А.М. Курс квантовой механики для химиков: Учеб. пособие. 2-е изд., перераб. И доп. М.: Высш. шк., 1980. 215 с.
7. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985. 472 с.
8. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир, 1979. 504 с.
9. Мелёшина А.М. Курс квантовой химии: Учеб. пособие. Воронеж: Изд-во Воронеж. ун-та, 1981. 198 с.
10. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.: Высш. шк., 1979. 407 с.

### **Дополнительная литература:**

1. Абаренков И.В., Братцев В.Ф., Тулуб А.В. Начала квантовой химии. Учебное пособие. М.: Высш. шк., 1989. 303 с.
2. Балашов В.В., Долинов В.К. Курс квантовой механики. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1982. 280 с.
3. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений: Введение в теорию. 3-е изд. Л.: Химия, 1986. 288 с.
4. Болотин А.Б., Степанов Н.Ф. Теория групп и ее применение в квантовой механике молекул. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1973. 227 с.
5. Дей К., Селбин Д. Теоретическая неорганическая химия. 3-е изд. М.: Химия, 1976. 568 с.

6. Дьюар М., Догерти Р. Теория возмущенных молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир, 1977. 695 с.
7. Кларк Т. Компьютерная химия. М.: Мир, 1990. 381 с.
8. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь: Учеб. пособие. 2-е изд. М.: Высш. шк., 1984. 275 с.
9. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия. 1986. 248 с.
10. Пирсон Р. Правила симметрии в химических реакциях. М.: Мир, 1979. 592 с.
11. Салем Л. Электроны в химических реакциях. М.: Мир, 1985. 285 с.
12. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по квантовой теории молекул., 1992.
13. Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия: Учеб. пособие. М.: Изд-во Москва, 1991. 384 с.
14. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения М.: Мир, 1983. 396 с.
15. Харгиттаи.И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. М.: Мир, 1989. 494 с.
16. Хофман Р. Строение твердых тел и поверхностей: Взгляд химика-теоретика. М.: Мир, 1990. 214 с.
17. Эткинс П. Кванты: Справочник концепций. М.: Мир, 1977. 496 с.
18. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К. Химическая связь. Киев: Вища шк., 1975. 304 с.

## **VI. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ**

Целью проведения практических занятий является закрепление полученных студентами на лекциях знаний, применение знаний на практике, а также проверка эффективности самостоятельной работы студентов.

Занятие обычно представляет собой решение задач квантовой химии. При этом выявляется степень владения студентами материалом лекционного курса. Далее выявляется способность студентов применять полученные теоретические знания к решению задач.

Подготовку к практическому занятию целесообразно начинать с повторения материала лекций. При этом следует учитывать, что лекционный курс лимитирован по времени и не позволяет лектору детально рассмотреть все аспекты изучаемого вопроса. Следовательно, требуется самостоятельно расширять познания как теоретического, так и практического характера. В то же время, лекции дают студентам хороший ориентир для поиска

дополнительных материалов, так как задают определенную структуру и логику изучения того или иного вопроса.

В ходе самостоятельной работы студенту в первую очередь надо изучить материал, представленный в рекомендованной кафедрой и/или преподавателем учебной литературе. Следует обратить внимание студентов, что в список рекомендуемой литературы включены не только базовые учебники, но и более углубленные источники по каждой теме курса. Последовательное изучение предмета позволяет студентам сформировать устойчивую теоретическую базу.

## **VII. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

Для осуществления образовательного процесса по дисциплине «Квантовая химия» необходима аудитория, снабженная мультимедийным оборудованием.



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Дальневосточный федеральный университет»  
(ДВФУ)

---

**ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК**

**УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ  
РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ**

по дисциплине «Квантовая химия»

**Направление подготовки 03.03.02 Физика**

**Форма подготовки очная**

**Владивосток  
2017**

**План-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине  
«Теоретическая механика»**

<b>№ п/п</b>	<b>Дата/сроки выполнения</b>	<b>Вид самостоятельной работы</b>	<b>Примерные нормы времени на выполнение</b>	<b>Форма контроля</b>
1	1-10 неделя	Решение задач, подготовка к коллоквиуму, подготовка к практическим занятиям.	30	Собеседование (УО-1), Устный опрос (УО-1), Тест (ПР-1)
2	11-17 неделя	Решение задач, подготовка к коллоквиуму, подготовка к практическим занятиям.	30	Собеседование (УО-1), Устный опрос (УО-1), Тест (ПР-1)
3	18 неделя	Подготовка к экзамену	12	Зачет

**Учебно-методические указания по организации самостоятельной работы студентов**

Приступая к изучению дисциплины «Квантовая химия», студент должен знать физику и математику в пределах программы вуза. Однако при рассмотрении и анализе некоторых процессов и явлений (особенно их теоретических аспектов) желательно наличие дополнительных знания по математике. К ним относятся: понятия и теоремы векторного анализа (градиент функции, дивергенция, теоремы Гаусса Остроградского и Стокса и т.д.); понятия теории вероятности и математической статистики (средние, среднеквадратичные значения физических величин, вероятности, функции распределения и т.д.); общие методы решения простейших дифференциальных уравнений первого и второго порядков и т.д.

В рабочей программе предусматривается изучение данной дисциплины в соответствии с приведенной в ней последовательностью разделов. Их изучение запланировано таким образом, чтобы материал последующего раздела опирался или был тесно связанным с материалом предыдущего. Такая последовательность является одной из особенностей организации изучения дисциплины. Кроме того, организация изучения дисциплины предусматривает демонстрацию некоторых видеолекций, обсуждение конкретных ситуаций, возникающих в процессе изучения того или иного материала и т.д. Самостоятельная работа студента включает в себя чтение дополнительной рекомендуемой литературы по изучаемым темам, самостоятельное изучение некоторых тем, выполнение домашнего задания.

### **Рекомендации по освоению дисциплины на лекционных занятиях:**

- перед очередной лекцией необходимо просмотреть по конспекту и рекомендованной учебной литературе материал предыдущей лекции;
- бегло ознакомиться с содержанием очередной лекции по основным источникам литературы в соответствии с рабочей программой дисциплины;
- при затруднениях необходимо обратиться к лектору по графику его консультаций или на практических занятиях. Рекомендации по освоению дисциплины на практических занятиях:
  - на занятия носить конспект лекций и рекомендованный сборник задач;
  - до очередного практического занятия по конспекту и рекомендованной учебной литературе проработать теоретический материал, соответствующий темы занятия;
  - в начале занятий задать преподавателю вопросы по материалу, вызвавшему затруднения в понимании и освоении при решении задач, заданных для самостоятельного решения.



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Дальневосточный федеральный университет»  
(ДФУ)

---

**ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК**

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ**  
Квантовая химия  
Направление подготовки - 03.03.02 Физика  
Форма подготовки очная

**Владивосток**  
**2017**

## Паспорт ОС

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
ПК-6 способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	Знает	<p>основные понятия, постулаты, приближенные методы решения уравнения Шредингера, результаты его решения для модельных задач квантовой химии; основные характеристики электронной структуры атомов и молекул; методику расчетов электронной структуры атомно-молекулярных систем; основные понятия и определения квантовой механики, а также с современное состояние квантовой химии.</p> <p>фундаментальные принципами и методами решения научных и практических задач;</p>
	Умеет	<p>применять теорию для классификации атомных и молекулярных состояний; рассчитывать молекулярные свойства химических систем; формулировать квантово-химическую задачу и решать ее с использованием соответствующих программ; выбирать базисные наборы и квантово-химические методы для расчета требуемых свойств различных химических систем; использовать основные законы квантовой химии в профессиональной деятельности</p>
	Владеет	<p>приемами и методами математического анализа и моделирования, теоретического исследования химических процессов; системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания;</p> <p>навыками работы с компьютерами в области квантово-химического моделирования химических процессов; навыками работы с типичными квантово-химическими программами, расчета и интерпретации характеристик электронного строения и свойств атомных и молекулярных систем.</p>



№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций		Оценочные средства	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
1	Темы 1-13.	ПК-6	знает	Собеседование (УО-1)	Вопросы теста, контрольная работа, вопросы на зачет.
			умеет	Устный опрос (УО-1)	
			владеет	Тест (ПР-1)	

### Шкала оценивания уровня сформированности компетенций

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	критерии	Показатели
ПК-6 способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	знает (пороговый уровень)	основные теории квантовой химии, позволяющих описать явления в природе	основные понятия и определения квантовой механики, а также с современное состояние квантовой химии.
	умеет (продвинутой)	использовать основные законы квантовой химии в профессиональной деятельности	применять фундаментальные принципы и методы решения научных и практических задач
	владеет (высокий)	системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания	системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания

### Методические рекомендации, определяющие процедуры оценивания результатов освоения дисциплины

Промежуточная аттестация студентов. Промежуточная аттестация студентов по дисциплине «Теоретическая механика» проводится в

соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной. Промежуточная аттестация по дисциплине «Квантовая химия» проводится в форме экзамена, который выставляется при сдаче всех отчетных мероприятий по текущей аттестации.

**Текущая аттестация студентов.** Текущая аттестация студентов по дисциплине «Квантовая химия» проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной.

## **Оценочные средства для промежуточной аттестации**

### **Примеры тем рефератов к зачету**

1. Экспериментальные подтверждения волновых свойств корпускул.
2. История создания квантовой механики.
3. Водородоподобные атомы и системы.
4. Частица в одномерной потенциальной яме конечной глубины
5. Линейный гармонический осциллятор. Примеры применения модели.
6. Движение в центральном поле сил. Ротатор. Примеры применения модели.
7. Базисные наборы Даннинга.
8. Сравнительная характеристика методов учета корреляционной энергии.
9. Современное квантово-химическое программное обеспечение.
10. Анализ научной литературы по квантово-химическому исследованию (по определенной теме).
11. Природа химической связи с позиции квантовой теории.
12. Методы анализа электронной плотности.

### **Вопросы к экзамену**

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. Разложение по собственным функциям эрмитова оператора. Коммутационные соотношения.
6. Операторы координат, импульсов, моментов импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан).

7. Соотношения неопределенностей. Физический смысл и простейшие оценки на их основе.
8. Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера. Дискретный и непрерывный спектры.
9. Простейшие примеры применения квантовой механики. Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций. 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. Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод. Метод Ритца.
13. Спин элементарных частиц и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления.
14. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.
15. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Роль представлений о ППЭ в современной структурной теории химии. Равновесная конфигурация и конформации молекул. Стационарные точки ППЭ, их анализ. Простейшие примеры ППЭ. Двухатомная молекула. Оптимизация геометрических характеристик молекулы. ППЭ и химическая реакция, координата реакции.
16. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение.
17. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока (самосогласованного поля, ССП). Детерминант Слэтера. Понятие о закрытых и открытых оболочках.
18. Орбитальные энергии и их связь с полной электронной энергией. Теорема Купманса и фотоэлектронные спектры. Пределы применимости метода Хартри-Фока.
19. Коррелированное движение электронов. Составляющие электронной корреляции. Учет энергии электронной корреляции.

20. Понятие о методе конфигурационного взаимодействия.
21. Основные понятия метода теории возмущений, теория Меллера-Плессе.
22. Метод объединенных кластеров: основная концепция.
23. Сравнительная характеристика многодетерминантных методов учета коррелированного движения электронов.
24. Электронное строение атомов. Электронные конфигурации и термы атомов. Сложение моментов для атомов. Правила Хунда.
25. Электронное строение атомов и периодическая система элементов Д.И. Менделеева.
26. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).
27. Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа. Минимальные и валентно-расщепленные базисные наборы. Поляризационные и диффузные функции.
28. Метод ССП МО ЛКАО.
29. Учет симметрии ядерной конфигурации при рассмотрении электронной задачи. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии.
30. Полуэмпирические методы квантовой химии. Методы, использующие нулевое дифференциальное перекрытие. Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии.
31. Общие положения теории функционала плотности. Теорема Хоэнберга и Кона. Метод Кона-Шэма, сравнительная характеристика методов Хартри-Фока и Кона-Шэма.
32. Виды корреляционно-обменного функционала: приближения локальной плотности и обобщенного градиента, гибридные методы. Вычислительные особенности методов теории функционала плотности.
33. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Наиболее распространенные программные комплексы.
34. Подготовка исходного файла в программе Firefly. Ключевые слова как способ управления расчетом. Группы \$contrl, \$system, \$basis, \$statpt, \$data.
35. Составление Z-матрицы. Базисные атомы. Определение начального приближения геометрических параметров молекулы. Учет симметрии при задании начального приближения. Z-матрица стиля GAUSSIAN.
36. Основные результаты квантово-химических расчетов. Визуализация результатов расчета.