

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 01.11.2023 16:48:03
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В.Пекаревский
«_26_» __марта__ 2019 г.

**Рабочая программа дисциплины
ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Направленность программы бакалавриата

Физическая химия и химия материалов

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Факультет **химии веществ и материалов**

Кафедра **физической химии**

Санкт-Петербург

2019

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Заведующий кафедрой		доцент Изотова С.Г.

Рабочая программа дисциплины обсуждена на заседании кафедры физической химии
протокол от «05» февраля 2019 № 6
Заведующий кафедрой

С.Г.Изотова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов
протокол от «21» марта 2019 № 6

Председатель

С.Г.Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Химия»		С.Г.Изотова
Директор библиотеки		Т.Н.Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И.Богданова
Начальник учебно-методического управления		С.Н.Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	5
3. Объем дисциплины.....	5
4. Содержание дисциплины.....	6
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	6
4.2. Занятия лекционного типа.....	6
4.3. Занятия семинарского типа.....	7
4.3.1. Семинары, практические занятия.....	7
4.3.2. Занятия лабораторного типа.....	8
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	8
4.5. Темы индивидуальных заданий.....	9
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	9
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	9
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.....	10
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	10
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	10
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	11
10.1. Информационные технологии.....	11
10.2. Программное обеспечение.....	11
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	11
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.....	11
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	11

Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

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

В результате для освоения образовательной программы бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p>ПК-1 Способен выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам</p>	<p>ПК-1.В.16.1 Выполнение стандартных операций по квантово-химическому моделированию структуры и определению свойств молекул</p>	<p>Знать особенности работы с квантово-химическими пакетами Уметь моделировать структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов Владеть навыками получения геометрически оптимизированных структур молекул и определения их свойств</p>
<p>ПК-4 Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов</p>	<p>ПК-4.В.16.1 Использование квантово-химических законов и закономерностей для расчета структуры и свойств молекул</p>	<p>Знать основные квантово-химические уравнения и понятия Уметь выполнять квантово-химические расчеты молекулярных спектров, структуры молекул и их свойств Владеть навыками использования квантово-химических данных для интерпретации молекулярных спектров, определения структуры молекул и их свойств</p>
<p>ПК-5 Способен получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий</p>	<p>ПК-5.В.16.1 Выбор и использование квантово-химического метода расчета молекулярных свойств</p>	<p>Знать квантово-химические пакеты, методы и их возможности Уметь создавать входные файлы для работы с квантово-химическими пакетами Владеть навыками анализа выходных данных по результатам квантово-химических расчетов</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Основы квантовой химии» (Б1.В.16) относится к дисциплинам, формируемым участниками образовательных отношений, и изучается на 4 курсе в 7 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Физическая химия» и «Физические методы исследования». Полученные в процессе изучения дисциплины знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплины «Физико-химические методы исследования веществ и материалов», при прохождении производственной практики, а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	5/ 180
Контактная работа с преподавателем:	117
занятия лекционного типа	36
занятия семинарского типа, в т.ч.	72
семинары, практические занятия	72
лабораторные работы	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	9
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	36
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	Тесты, Кр, индивидуальные задания
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	Экзамен/27

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1.	Тема 1 – Химическая связь	24	12	-	18	ПК-1 ПК-4	ПК-1.В.16.1 ПК-4.В.16.1
2.	Тема 2 – Квантово-химические расчеты	12	60	-	18	ПК-1 ПК-4 ПК-5	ПК-1.В.16.1 ПК-4.В.16.1 ПК-5.В.16.1

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Инновационная форма
1	Типы связей. Использование электроотрицательности для суждения о степени ионности связи. Кривые потенциальной энергии. Уравнения Ми и Морзе.	4	традиционная лекция, лекция-визуализация
1	Вычисление энергии ионной связи в индивидуальной молекуле. Взаимная поляризация ионов. Энергия ионной кристаллической решетки. Уравнение Борна. Цикл Габер-Борна.	4	традиционная лекция, лекция-визуализация
1	Основные квантово-химические представления об атомах, используемые в учении о химической связи (уравнение де Бройля, принцип Гейзенберга, волновая функция, уравнение Шредингера и результаты его решения для атома водорода и водородоподобных ионов).	4	традиционная лекция, лекция-визуализация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
1	Основы метода молекулярных орбиталей. Волновые функции связывающих и разрыхляющих орбиталей на примере молекул H_2^+ и H_2 . Образование МО из АО в гомоядерных (N_2 , O_2) и гетероядерных двухатомных молекулах (NO , CO , HF). Атомные и молекулярные термы. Метод Хюккеля и его применение к сопряженным системам. Молекулярные диаграммы. Рассмотрение многоатомных молекул в рамках методов МО, ЛКАО и ВС (гибридизация). Пространственное строение молекул.	12	традиционная лекция, лекция-визуализация
2	Современные квантово-химические программные пакеты, используемые в химии.	4	лекция-визуализация
2	Возможности квантово-химического расчета молекулярных и энергетических свойств, термодинамических функций, колебательных спектров, ЯМР-спектров, дипольных моментов, поляризуемости, кинетических характеристик химических реакций.	8	лекция-визуализация

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
1	Атомные и молекулярные термы. Метод Хюккеля и его применение к сопряженным системам. Молекулярные диаграммы.	12	компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности
2	Квантово-химический пакет. Правила работы. Организация входного файла. Анализ выходного файла. Программы-визуализаторы.	12	компьютерная симуляция
2	Квантово-химический расчет молекулярных свойств	24	компьютерная симуляция
2	Квантово-химический расчет кинетики химических реакций	12	компьютерная симуляция
2	Научный семинар «Современные квантово-химические методы исследования строения и свойств молекул»	12	занятие – конференция, круглый стол

4.3.2. Занятия лабораторного типа.

Не предусмотрены.

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Типы химических связей. Основные квантово-химические представления об атомах, используемые в учении о химической связи. Использование одноэлектронного приближения (метода ССП Хартри-Фока) для решения уравнения Шредингера применительно к многоэлектронным атомам. Изучение квантово-механических методов расчета энергии ковалентных связей. Выполнение индивидуального задания по методу молекулярных орбиталей как линейной комбинации атомных орбиталей №1. Построение молекулярных диаграмм гомоядерных и гетероядерных двухатомных молекул. Определение термов основного и возбужденного состояний двухатомных молекул. Образование МО из АО в гомоядерных и гетероядерных двухатомных молекулах. Выполнение индивидуального задания по построению и анализу молекулярной диаграммы и определению молекулярного термина.	18	Устный опрос, защита индивидуального задания №1, тестирование
2	Подготовка слайд-презентации доклада к научному семинару «Современные квантово-химические методы исследования строения и свойств молекул»	6	проверка слайд-презентации, выступление на научном семинаре
2	Выполнение индивидуального задания по квантово-химическому расчету полной энергии и дипольного момента молекулы	2	Защита индивидуального задания №2
2	Выполнение индивидуального задания по квантово-химическому расчету термодинамических функций молекулы	2	Защита индивидуального задания №2
2	Выполнение индивидуального задания по квантово-химическому расчету числа и типов нормальных колебаний молекулы, расчета колебательных спектров	2	Защита индивидуального задания №2
2	Выполнение индивидуального задания по квантово-химическому расчету ЯМР-спектра молекулы	2	Защита индивидуального задания №2

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	Выполнение индивидуального задания по квантово-химическому расчету кинетики химической реакции	4	Защита индивидуального задания №3

4.5. Темы индивидуальных заданий

Темы индивидуальных заданий:

№1 – *Химическая связь. Метод молекулярных орбиталей.*

№2 – *Квантово-химический расчет молекулярных свойств.*

№3 – *Изучение кинетики химической реакции с помощью квантово-химических расчетов.*

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте:

<http://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена.

Экзамен предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки знаний) и задача (для проверки умений и навыков).

При сдаче экзамена, студент получает два вопроса из перечня вопросов и задачу, время подготовки студента к устному ответу - до 45 мин.

Пример варианта вопросов и задачи на экзамене:

Вариант №...
<p>1. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока.</p> <p>2. Квантово-химический расчет колебательных спектров и нормальных колебаний.</p> <p>3. Задача. Изобразите энергетическую диаграмму молекулы АВ. Определите терм основного электронного состояния молекулы, порядок связи. Как изменится энергия связи и равновесное межъядерное расстояние, если молекулу АВ перевести в состояние иона АВ⁺?</p>

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – оценка «удовлетворительно».

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.

а) печатные издания:

1. Ельяшевич, М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. Ч. 1: Общие вопросы спектроскопии / М. А. Ельяшевич. – 5-е изд., стер. – М.: Кн.дом «Либроком», 2011. – 236 с.
2. Ельяшевич, М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия Ч. 2: Атомная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. – 5-е изд., – М.: Кн.дом «Либроком», 2009. – 415 с.
3. Ельяшевич, М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия Ч. 3: Молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. - 5-е изд., – М.: Кн.дом «Либроком», 2009. – 527 с.
4. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие / В.И. Барановский. – М.: Академия, 2008. – 384с.

б) электронные учебные издания:

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В.Г. Цирельсон. – Бинوم. Лаборатория знаний, 2017 – 522 с. (ЭБС «Лань»)

8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.

Учебный план, РПД, учебно-методические материалы, размещенные на <http://media.technolog.edu.ru>.

Электронно-библиотечные системы:

ЭБС «Лань»: <https://e.lanbook.com/books/>;

электронный читальный зал – БиблиоТех фундаментальной библиотеки СПбГТИ(ТУ): <http://bibl.lti-gti.ru/ЭБС.>, <https://technolog.bibliotech.ru/>.

справочно-информационный портал «Научная электронная библиотека»: <http://elibrary.ru>.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКВД. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

плановость в организации учебной работы;

серьезное отношение к изучению материала;

постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея знания по уже изученному материалу.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- взаимодействие с обучающимися посредством электронной почты.

10.2. Программное обеспечение.

Windows XP Starter Edition. (Государственный контракт № 24 от 14.09.2007, срок действия – бессрочно),

Microsoft Office (Microsoft Excel): Office 2007 Russian OLP NL AE (Государственный контракт № 24 от 14.09.2007, срок действия – бессрочно), Office Std 2013 Rus OLP NL (Контракт № 02(03)15 от 15.01.2015, срок действия -20 лет),

- LibreOffice (открытая лицензия),
- программный комплекс Gaussian 9.

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»

11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.

Для проведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники с лицензионным программным обеспечением и выходом в интернет и на сервер образовательной организации, на 33 посадочных места.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Основы квантовой химии»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-1	Способен выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	промежуточный
ПК-4	Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	промежуточный
ПК-5	Способен получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
ПК-1.В.16.1 Выполнение стандартных операций по квантово-химическому моделированию структуры и определению свойств молекул	Знает особенности работы с квантово-химическими пакетами	Ответы на вопросы к экзамену №1-13, выполнение индивидуальных заданий № 1-3	Перечисляет особенности работы с квантово-химическими пакетами с ошибками	Перечисляет особенности работы с квантово-химическими пакетами с незначительными ошибками, с помощью наводящих вопросов преподавателя	Правильно перечисляет особенности работы с квантово-химическими пакетами
	Умеет моделировать структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов	Ответы на вопросы к экзамену №1-3, выполнение индивидуальных заданий № 1-3	Поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов с ошибками	Поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов,

	Владеет навыками получения геометрически оптимизированных структур молекул и определения их свойств	Ответы на вопросы к экзамену №4-13, выполнение индивидуальных заданий № 1-3	Демонстрирует навыки получения геометрически оптимизированных структур молекул и определения их свойств с помощью квантово-химических пакетов с ошибками	Демонстрирует навыки получения геометрически оптимизированных структур молекул и определения их свойств с помощью квантово-химических пакетов с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Демонстрирует навыки получения геометрически оптимизированных структур молекул и определения их свойств с помощью квантово-химических пакетов, анализирует полученные результаты
ПК-4.В.16.1 Использование квантово-химических законов и закономерностей для расчета структуры и свойств молекул	Знает основные квантово-химические уравнения и понятия	Ответы на вопросы к экзамену №14-28, выполнение индивидуальных заданий № 1-3, результаты устного опроса	Записывает основные квантово-химические уравнения и дает определения основных понятий с ошибками	Записывает основные квантово-химические уравнения и дает определения основных понятий с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно записывает основные квантово-химические уравнения и дает определения основных понятий, анализирует полученные результаты
	Умеет выполнять квантово-химические расчеты молекулярных спектров, структуры молекул и их свойств	Ответы на вопросы к экзамену №5-13, выполнение индивидуальных заданий № 1-3	Показывает алгоритм выполнения квантово-химические расчеты молекулярных спектров, структуры молекул и их свойств с	Показывает алгоритм выполнения квантово-химические расчеты молекулярных спектров, структуры молекул и их свойств с	Правильно показывает алгоритм выполнения квантово-химические расчеты молекулярных спектров, структуры молекул и их свойств, анализирует полученные

			ошибками	незначительными ошибками, с помощью преподавателя	результаты
	Владеет навыками использования квантово-химических данных для интерпретации молекулярных спектров, определения структуры молекул и их свойств	Ответы на вопросы к экзамену №5-13, 31-43, выполнение индивидуальных заданий № 1-3	Рассказывает особенности использования квантово-химических данных для интерпретации молекулярных спектров, определения структуры молекул и их свойств с ошибками	Рассказывает особенности использования квантово-химических данных для интерпретации молекулярных спектров, определения структуры молекул и их свойств с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно рассказывает особенности использования квантово-химических данных для интерпретации молекулярных спектров, определения структуры молекул и их свойств, приводит примеры
ПК-5.В.16.1 Выбор и использование квантово-химического метода расчета молекулярных свойств	Знает квантово-химические пакеты, методы и их возможности	Ответы на вопросы к экзамену №29-30, выполнение индивидуальных заданий № 1-3, презентация на научном семинаре «Современные квантово-химические методы исследования строения и свойств	Перечисляет квантово-химические пакеты, методы и их возможности с ошибками	Перечисляет квантово-химические пакеты, методы и их возможности с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно перечисляет квантово-химические пакеты, методы и их возможности, правильно выбирает квантово-химический метод расчета

		молекул»			
	Умеет создавать входные файлы для работы с квантово-химическими пакетами	Ответы на вопросы к экзамену №2-4, выполнение индивидуальных заданий № 1-3	Показывает алгоритм создания входных файлов для работы с квантово-химическими пакетами с ошибками	Показывает алгоритм создания входных файлов для работы с квантово-химическими пакетами с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно формирует входные файлы для работы с квантово-химическими пакетами
	Владеет навыками анализа выходных данных по результатам квантово-химических расчетов	Ответы на вопросы к экзамену №31-43, выполнение индивидуальных заданий № 1-3	Демонстрирует навыки анализа выходных данных по результатам квантово-химических расчетов с ошибками	Демонстрирует навыки анализа выходных данных по результатам квантово-химических расчетов с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Демонстрирует навыки анализа выходных данных по результатам квантово-химических расчетов, сопоставляет полученные расчетные данные с экспериментальными

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена, шкала оценивания – балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»).

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации (экзамена)

а) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-1 (ПК-1.В.16.1 Выполнение стандартных операций по квантово-химическому моделированию структуры и определению свойств молекул):

1. Моделирование структуры в квантово-химических программных пакетах.
2. Формирование входного файла для выполнения квантово-химических расчетов
3. Визуализация квантово-химических расчетов и их интерпретация.
4. Поиск по выходному файлу квантово-химических расчетов.
5. Квантово-химическое моделирование кинетики химических реакций.
6. Квантово-химическое моделирование спектров.
7. Квантово-химический расчет молекулярных и энергетических свойств.
8. Квантово-химический расчет термодинамических функций.
9. Квантово-химический расчет поверхности потенциальной энергии.
10. Квантово-химический расчет колебательных спектров и нормальных колебаний.
11. Квантово-химический расчет ЯМР-спектров.
12. Квантово-химический расчет электронных спектров.
13. Квантово-химическое построение молекулярных диаграмм.

б) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-4 (ПК-4.В.16.1 Использование квантово-химических законов и закономерностей для расчета структуры и свойств молекул):

14. Кривые потенциальной энергии при образовании двух- и многоатомных молекул. Взаимосвязь с основными параметрами химической связи (энергия, длина, направленность, насыщенность). примеры.

15. Главное, орбитальное, магнитное и спиновое квантовые числа как решение уравнения Шредингера для одно- и многоэлектронных атомов и ионов.

16. Диаграммы молекулярных орбиталей гомо- и гетероядерных двухатомных молекул.

17. Молекулярные термы.

18. Методы определения структуры многоатомных молекул.

19. Типы химических связей.

20. Использование электроотрицательности атомов для суждения о степени ионности связи.

21. Вычисление энергии связи в индивидуальной газовой молекуле и ионном кристалле.

22. Основные понятия и приближения квантовой химии. Приближение Шредингера, адиабатической приближение, одноэлектронное приближение. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока.

23. Основы метода молекулярных орбиталей (МО). Вариационный принцип. Связывающие и разрыхляющие молекулярные орбитали на примере молекулы H_2^+ .

24. Основные требования, предъявляемые к атомным орбиталам (АО) при составлении МО по методу МОЛКАО.

25. Классификация молекулярных орбиталей. Форма граничных поверхностей МО. Образование молекулярных орбиталей в гомоядерных молекулах.

26. Образование МО в гетероядерных молекулах (CO, HF).

27. Строение многоатомных молекул в рамках методов МО ЛКАО и ВС. Гибридизация.

28. Метод Хюккеля и его применение к сопряженным системам. Молекулярные диаграммы.

б) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-5 (ПК-5.В.16.1 Выбор и использование квантово-химического метода расчета молекулярных свойств):

29. Современные квантово-химические методы исследования строения и свойств молекул.
30. Современные квантово-химические программные пакеты, используемые в химии.
31. Интерпретация экспериментальных колебательных спектров с использованием квантово-химических расчетов. (Число и типы нормальных колебаний. Активность в ИК и КР спектрах. Механизм возникновения колебательных спектров молекул в модели гармонический осциллятор. Механизм возникновения колебательных спектров молекул в модели ангармонический осциллятор. Механизм возникновения колебательно-вращательных спектров молекул. Механизм возникновения электронно-колебательно-вращательных спектров молекул.)
32. Определение термодинамических функций из квантово-химических расчетов. (Определение статистических термодинамических функций из молекулярных спектров)
33. Определение молекулярных геометрических характеристик из квантово-химических данных.
34. Определение кинетических параметров из квантово-химических расчетов. (Кинетика простых реакций. Теории элементарных актов. Теория переходного состояния. Энергия активации.)
35. Определение энергетических характеристик функций из квантово-химических данных.
36. Определение магнитных свойств по результатам анализа молекулярных диаграмм
37. Интерпретация ЯМР спектра с использованием квантово-химических расчетов.
38. Сопоставление расчетных и экспериментальных колебательных спектров молекул.
39. Сопоставление расчетных и экспериментальных электронных спектров молекул.
40. Сопоставление расчетных и экспериментальных ЯМР спектров молекул.
41. Сопоставление расчетных и экспериментальных магнитных свойств молекул.
42. Сопоставление расчетных и экспериментальных термодинамических характеристик молекул.
43. Сопоставление расчетных и экспериментальных электрических свойств молекул.

При сдаче экзамена, студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше, и задачу.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 45 мин.

4. Примеры индивидуальных заданий

Индивидуальное задание №1 – Химическая связь. Метод молекулярных орбиталей

1. Запишите электронные конфигурации атома А и атома В.
2. Запишите электронную конфигурацию молекулы АВ (за основу примите молекулярные орбитали гомоядерных молекул).
3. Нарисуйте схематически энергетическую диаграмму молекулы АВ.
4. Распределите электроны на электронных энергетических уровнях.
5. Определите терм основного электронного состояния молекулы АВ.

6. Определите порядок связи А-В.
7. Установите: обладает ли вещество АВ диамагнитными или парамагнитными свойствами?
8. Обладает ли молекула АВ электрическим диполем?
9. Как изменится энергия связи и равновесное межъядерное расстояние, если молекулу АВ перевести в состояние иона АВ⁺?
10. Как изменится энергия связи и равновесное межъядерное расстояние, если молекулу АВ перевести в состояние иона АВ⁻?
11. Рассчитайте энергию молекулярных орбиталей с помощью квантово-химических расчетов. Проанализируйте форму электронных облаков молекулярных орбиталей.
12. Постройте молекулярную диаграмму по результатам расчетов.
13. Определите энергии НОМО и LUMO орбиталей.
14. Оцените с помощью квантово-химических расчетов дипольный момент молекулы. Сравните с экспериментальным значением.

Вариант	Молекула АВ		
	1	НН	НLi
2	LiН	LiLi	LiO
3	СН	CN	СС

Индивидуальное задание №2 – Квантово-химический расчет молекулярных свойств

1. С помощью квантово-химического пакета постройте структуру молекулы А.
2. Выполните процедуру оптимизации структуры.
3. Рассчитайте энергетические характеристики молекулы А (полную энергию, дипольный момент, поляризуемость).
4. Рассчитайте колебательный спектр молекулы А. Определите число и значения волновых чисел нормальных колебаний молекулы А. Определите их типы.
5. Найдите в электронно-справочных ресурсах интернета экспериментальный спектр молекулы А. Проведите интерпретацию наблюдаемых спектральных полос с помощью произведенных квантово-химических расчетов.
6. Рассчитайте электронный спектр молекулы А. Определите длину волны перехода электрона с основного уровня.
7. Рассчитайте ЯМР спектр молекулы. Сравните с экспериментальным спектром, найденном с помощью электронно-справочных ресурсов интернета или в научной литературе. Соотнесите наблюдаемые пики с атомами водорода в молекуле.
8. Используйте квантово-химические расчетные данные для определения термодинамических функций молекулы А.

Вариант	Молекула А		
	1	C ₆ H ₆	C ₆ H ₅ Cl
2	(CH ₃) ₂ CO	C ₆ H ₅ OH	C ₆ H ₅ CH ₂ OH
3	C ₄ H ₁₀	C ₃ H ₈	C ₅ H ₁₂

Индивидуальное задание №3 – Изучение кинетики химической реакции с помощью квантово-химических расчетов

1. С помощью квантово-химической программы постройте структуры исходных и конечных реагирующих веществ.
2. Выполните процедуру оптимизации структуры молекул.
3. Рассчитайте энергетические характеристики молекул.

4. Рассчитайте колебательные спектры оптимизированных молекул. Определите значения волновых чисел нормальных колебаний молекул. Убедитесь, что построенные и оптимизированные структуры отвечают устойчивым состояниям молекул.

5. Проведите поиск переходных состояний. Рассчитайте для них колебательный спектр. Подтвердите, что рассчитанный колебательный спектр соответствует переходному состоянию.

6. Рассчитайте энергию активации химической реакции.

7. Оцените константу скорости химической реакции.

5. Типовые вопросы для подготовки к устному опросу

1. Кривые потенциальной энергии при образовании двух- и многоатомных молекул. Взаимосвязь с основными параметрами химической связи (энергия, длина, направленность, насыщаемость). примеры.

2. Различные подходы к определению электроотрицательностей элементов, применение к оценке степени ионности связи, ее прочности. Примеры.

3. Физико-химическая общность, различия, единый подход к описанию различных типов химической связи (ковалентной, ионной, полярной, металлической, донорно-акцепторной, неполярной, водородной, Ван-дер-ваальсовой).

4. Расчетный аппарат условий гибридизации электронных орбиталей и определение пространственной структуры молекул.

5. Основы математического аппарата метода молекулярных орбиталей.

6. Анализ влияния типа кристаллической решетки на физические и химические свойства вещества. Границы применимости уравнений Борна, Борна-Майера, Капустинского.

7. Главное, орбитальное, магнитное и спиновое квантовые числа как решение уравнения Шредингера для одно- и многоэлектронных атомов и ионов.

8. Диаграммы молекулярных орбиталей гомо- и гетероядерных двухатомных молекул.

9. Молекулярные термы.

10. Методы определения структуры многоатомных молекул.

6. Примерные темы сообщений на научном семинаре «Современные квантово-химические методы исследования строения и свойств молекул»:

1. Методы учета электронной корреляции: метод конфигурационного взаимодействия (CI, FCI, MCSCF).

2. Теория возмущений (MP).

3. Методы объединенных кластеров (CC, CCD, CCSD).

4. Теория функционала плотности (DFT). Приближение локальной плотности.

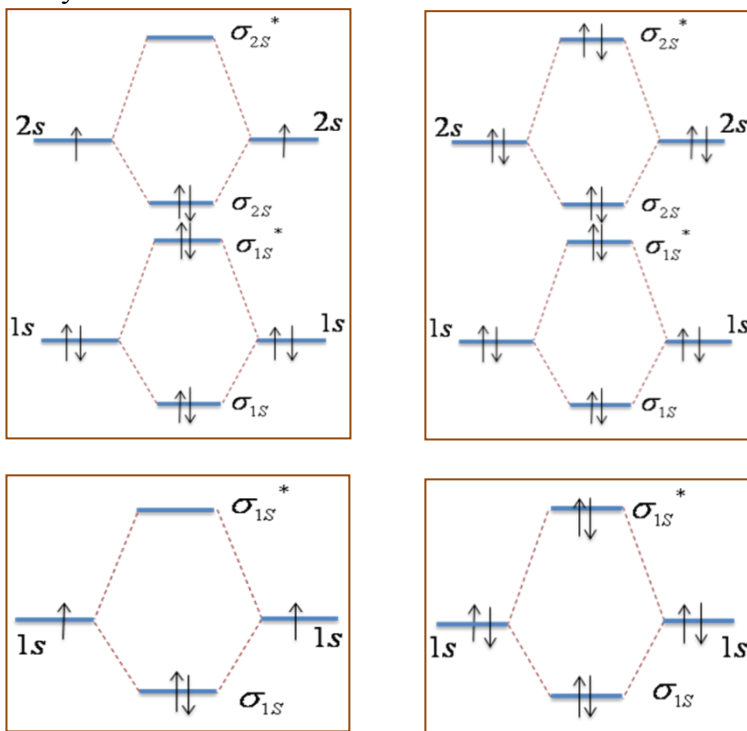
Методы градиентной коррекции. Гибридные методы.

5. Полуэмпирические методы (MNDO, AM1, PM3).

6. Программные квантово-химические продукты.

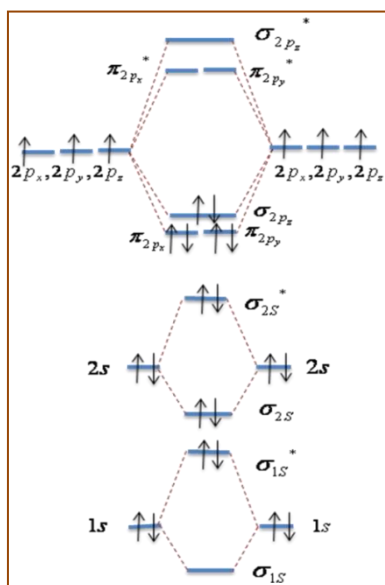
7. Примеры вариантов тестовых вопросов

1. Соотнесите представленные ниже диаграммы молекулярных орбиталей с молекулами.



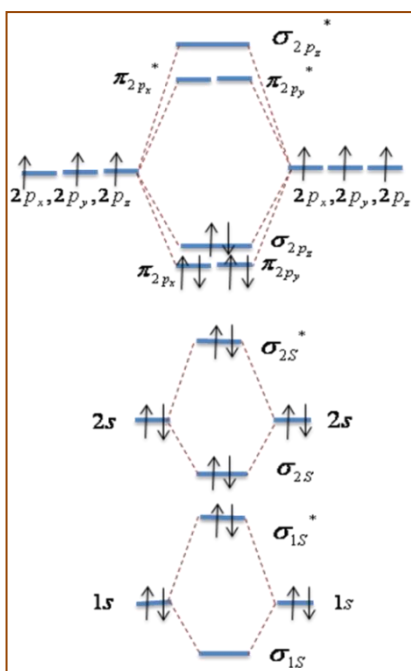
- а. 1 - B_2 , 2 - He_2 , 3 - H_2 , 4 - Li_2
 б. 1 - Li_2 , 2 - B_2 , 3 - H_2 , 4 - He_2
 в. 1 - B_2 , 2 - He_2 , 3 - Li_2 , 4 - H_2
 г. 1 - B_2 , 2 - Li_2 , 3 - He_2 , 4 - H_2

2. Представленная ниже диаграмма соответствует молекуле...



- а. O_2
 б. C_2
 в. N_2
 г. B_2

3. При переводе молекулы в состояние аниона электрон заполняет...



- а. $\pi_{2p_x}^*$ -орбиталь
- б. $\pi_{2p_y}^*$ -орбиталь
- в. $\sigma_{2p_z}^*$ -орбиталь
- г. σ_{2p_z} -орбиталь

8. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб ГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКВД Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена.

Шкала оценивания на экзамене балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»).