

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Ганеев Вилер Валиахметович  
Должность: Директор  
Дата подписания: 23.10.2023 12:59:30  
Уникальный программный ключ:  
fceab25d7092f3bff743e8ad3f8d57fddc1f5e66

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

Утверждено:  
на заседании кафедры биологии, экологии и химии  
протокол № 4 от 23.11.2022 г.  
Зав. кафедрой подписано ЭЦП/Онина С.А.

Согласовано:  
Председатель УМК  
факультета биологии и химии  
подписано ЭЦП/Чудинова Т.П.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)  
для очной формы обучения**

Квантовая химия  
Обязательная часть

---

**программа магистратуры**

Направление подготовки (специальность)  
04.04.01 Химия

---

Направленность (профиль) подготовки

---

Квалификация  
Магистр

---

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

Для приема: 2022 г.

Бирск 2022 г.

Составитель / составители: Газетдинов Р.Р.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций.....	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы.....	6
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся).....	6
4. Фонд оценочных средств по дисциплине .....	11
4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.....	11
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.....	13
4.3. Рейтинг-план дисциплины .....	19
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины .....	20
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.....	20
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины.....	20
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	21

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

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
Компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-3);	ОПК-3.1. Знать вычислительные методы и способы адаптации существующих программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности
		ОПК-3.2. Уметь использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности
		ОПК-3.3. Владеть навыками использования вычислительных методов и адаптации существующих программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности
Общепрофессиональные навыки	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием	ОПК-1.1. Знать способы анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, наблюдений и измерений	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием

	современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения (ОПК-1);		современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения
		ОПК-1.2. Уметь применять способы анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, наблюдений и измерений	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения
		ОПК-1.3. Владеть навыками владения анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, наблюдений и измерений	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения

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

Дисциплина «Квантовая химия» относится к обязательной части.

Дисциплина изучается на \_\_\_1\_\_\_ курсе в \_\_\_1\_\_\_ семестре.

Цель изучения дисциплины: изучение математического аппарата и теоретических аспектов квантовой механики, освоение практических аспектов применения квантовой химии (в частности, квантово-химические расчеты на ЭВМ).

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

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

**СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ**

дисциплины «Квантовая химия» на 1 семестр

очная

форма обучения

<b>Вид работы</b>	<b>Объем дисциплины</b>
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	3/108
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	31.2
лекций	8
практических/ семинарских	22
лабораторных	0
контроль самостоятельной работы (КСР)	0
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) ФКР	1.2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СРС)	42
Учебных часов на подготовку к экзамену (Контроль)	34.8

Форма контроля:

Экзамен 1 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов:				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		лекции,	практические занятия,	семинарские занятия,	лабораторные работы,			
		Лек	П	Эк	СР С			
1 курс / 1 семестр								
1	Квантовая механика.							
1.1	<p>Математический аппарат и основные постулаты квантовой механики.</p> <p>Предмет квантовой механики и квантовой химии. Операторы и их свойства. Постулаты квантовой механики. Волновая функция. Уравнение Шредингера.</p>	1	2		4	Осн. лит-ра №№ 1,2	Тестирование	Тестирование
1.2	<p>Приближенные методы решения уравнения Шредингера.</p> <p>Теория возмущений. Вариационный принцип.</p>	1	2		4	Осн. лит-ра №№ 1,2	Тестирование	Тестирование

1.3	Решения уравнения Шредингера для простейших задач.  Модели частицы в различных условиях. Линейный гармонический осциллятор. Электрон в центральном поле.	1	2		4	Осн. лит-ра №№ 1,2	Тестирование	Тестирование
2	Квантовая химия.							
2.1	Состояния молекул и уравнения Шредингера для атомов и молекул.  Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Уравнения Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений.	1	4		4	Осн. лит-ра №№ 1,2 Доп. лит-ра №№ 1,2	Практические работы	Тестирование, Практические работы
2.2	Метод самосогласованного поля Хартри-Фока.  Электронная энергия системы электронов. Орбитальные энергии. Закрытые и открытые оболочки. Орбитали Хартри-Фока. МО ЛКАО. Теорема Купманса. Метод Дирака-Фока.	1	4		4	Осн. лит-ра №№ 1,2	Практические работы	Практические работы, Тестирование
2.3	Классификация квантово-химических методов и базисных наборов.  Атомные орбитали. Базисные функции. Классификация базисных наборов.	1	4		4	Осн. лит-ра №№ 1,2 Доп. лит-ра № 2	Практические работы	Практические работы, Тестирование
2.4	Электронная корреляция.  Значения и типы корреляционных	1	2		8	Осн. лит-ра №№ 1,2	Практические работы	Практические работы, Тестирование

	эффектов. Методы учета электронной корреляции. Коррелированные методы. Метод функционала плотности. Метод Монте-Карло.							
2.5	Полуэмпирические, эмпирические и гибридные методы.  Многоуровневые методы. Полуэмпирические методы. Нулевое дифференциальное перекрывание. Методы Хюккеля. Эмпирические методы: молекулярная механика, методы QM/MM. Учет релятивизма.	1	2		10	Осн. лит-ра №№ 1,2	Практические работы	Тестирование, Практические работы
3	Экзамен			1	36			
Итого по 1 курсу 1 семестру		8	22	1	78			
Итого по дисциплине		8	22	1	78			

#### 4. Фонд оценочных средств по дисциплине

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

Код и формулировка компетенции: Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения (ОПК-1);

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения (Экзамен)			
		2 (Неудовлетворительно)	3 (Удовлетворительно)	4 (Хорошо)	5 (Отлично)
ОПК-1.1. Знать способы анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, наблюдений и измерений	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	Знания не сформированы	Знания недостаточно сформированы, несистемны	Знания сформированы, но имеют отдельные пробелы и неточности	Знания полностью сформированы
ОПК-1.2. Уметь применять способы анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, наблюдений и измерений	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных	Умения не сформированы	Умения не полностью сформированы	Умения в основном сформированы	Умения полностью сформированы

	приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения				
ОПК-1.3. Владеть навыками владения анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, наблюдений и измерений	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	Владение навыками не сформировано	Владение навыками неуверенное	Владение навыками в основном сформировано	Владение навыками уверенное

Код и формулировка компетенции: Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-3);

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения (Экзамен)			
		2 (Неудовлетворительно)	3 (Удовлетворительно)	4 (Хорошо)	5 (Отлично)
ОПК-3.1. Знать вычислительные методы и способы адаптации существующих программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Знания не сформированы	Знания недостаточно сформированы, несистемны	Знания сформированы, но имеют отдельные пробелы и неточности	Знания полностью сформированы

ОПК-3.2. Уметь использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Умения не сформированы	Умения не полностью сформированы	Умения в основном сформированы	Умения полностью сформированы
ОПК-3.3. Владеть навыками использования вычислительных методов и адаптации существующих программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Владение навыками не сформировано	Владение навыками неуверенное	Владение навыками в основном сформировано	Владение навыками уверенное

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.

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

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ОПК-1.1. Знать способы анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, наблюдений и измерений	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	Тестирование

ОПК-1.2. Уметь применять способы анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, наблюдений и измерений	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	Тестирование, Практические работы
ОПК-1.3. Владеть навыками владения анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, наблюдений и измерений	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	Тестирование, Практические работы
ОПК-3.1. Знать вычислительные методы и способы адаптации существующих программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Тестирование
ОПК-3.2. Уметь использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Тестирование, Практические работы
ОПК-3.3. Владеть навыками использования вычислительных методов и адаптации существующих программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Тестирование, Практические работы

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;

Шкалы оценивания:  
для экзамена:

- от 45 до 59 баллов – «удовлетворительно»;
- от 60 до 79 баллов – «хорошо»;
- от 80 баллов – «отлично».

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

+ : квантовая механика

2. Ядро атома состоит из ...

- : электронов и нейтронов

+ : нейтронов и протонов

- :  $\gamma$ -квантов

- : электронов, нейтронов и протонов

3. Чему противоречила планетарная модель атома?

+ : Классической механике Ньютона

+ : Электродинамике Максвелла

- : Квантовой механике

- : Квантовой хромодинамике

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

+ : постоянная Планка

5. Как называется основная константа квантовой механики?

- : Постоянная Неймана

+ : Постоянная Планка

- : Постоянная Гейзенберга

- : Постоянная Больцмана

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 %;

## Практические работы

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

### Полуэмпирические методы квантовой химии

#### Выполнение работы.

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

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

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

Для этого:

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

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

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

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

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

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания выполнения практических работ

Описание методики оценивания выполнения практических работ: оценка за выполнение 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:**

отлично 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;

хорошо 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;

удовлетворительно 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;

неудовлетворительно 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.

### **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, 1 курс / 1 семестр

1. Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной химической науки.
2. Основные постулаты квантовой механики. Квантовые состояния и волновые функции; основные свойства волновых функций.
3. Операторы физических величин (наблюдаемых); средние значения и дисперсии наблюдаемых. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве.
4. Математический аппарат квантовой механики. Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения. Вырождение.
5. Матричное представление операторов. Разложение по собственным функциям эрмитова оператора. Коммутационные соотношения.

6. Операторы координат, импульсов, моментов импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Соотношения неопределенностей. Физический смысл и простейшие оценки на их основе.
7. Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера. Дискретный и непрерывный спектры. Уравнение непрерывности.
8. Простейшие примеры применения квантовой механики. Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций.
9. Задачи о прямоугольном потенциальном ящике, потенциальном барьере и гармоническом осцилляторе.
10. Теория момента импульса. Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса. Правила сложения моментов импульса. Жесткий ротатор.
11. Задача об атоме водорода. Разделение переменных. Водородоподобные орбитали, графическое представление их радиальных и угловых частей. Вырождение одноэлектронных состояний как следствие симметрии центрального поля.
12. Приближенные методы решения квантовомеханических задач. Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие и при наличии вырождения. Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод. Метод Ритца.
13. Молекула в постоянных электрическом и магнитном полях. Дипольный электрический и магнитный моменты системы частиц. Снятие вырождения под влиянием постоянного электрического или магнитного поля (эффекты Штарка и Зеемана.)
14. Спин элементарных частиц и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления.
15. Квантовая система в переменном электромагнитном поле. Временная теория возмущений. Переходы под влиянием излучения и правила отбора. Коэффициенты Эйнштейна.
16. Системы тождественных частиц: фермионы и бозоны. Антисимметричность волновой функции для системы электронов. Представление волновой функции системы электронов в виде определителя.
17. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.
18. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри - Фока (самосогласованного поля, ССП).
19. Уравнения, определяющие орбитали. Орбитальные энергии и их связь с полной электронной энергией.
20. Понятие о методе конфигурационного взаимодействия. Метод валентных схем. Электронное строение атомов. Электронные конфигурации и термы атомов. Сложение моментов для атомов. Правила Хунда. Электронное строение атомов и периодическая система элементов Д.И. Менделеева.
21. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слэтеровского и гауссова типа. Метод ССП МО ЛКАО.
22. Симметрия и свойства молекул. Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии.  $\sigma$ - и  $\pi$ -орбитали.  $\pi$ -электронное приближение. Орбитали симметрии и эквивалентные орбитали.
23. Связывающие и разрыхляющие орбитали. Локализованные молекулярные орбитали, натуральные связывающие орбитали и классические представления о химической связи.
24. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Наиболее распространенные программные комплексы (MOPAC, GAUSSIAN, Hyper Chem, Material Studio и др.).

Образец экзаменационного билета

МИНОБРНАУКИ РФ ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ» БИРСКИЙ ФИЛИАЛ УУНиТ Кафедра биологии, экологии и химии	
Дисциплина: Квантовая химия очная форма обучения 1 курс 1 семестр	Курсовые экзамены 20__-20__ г. Направление 04.04.01 Химия Профиль:
<b>Экзаменационный билет № 1</b> 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.	
Дата утверждения: __.__.____	Заведующий кафедрой _____

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания ответа на экзамене

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

**Критерии оценки:**

- "**отлично**" 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;
- "**хорошо**" 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;
- "**удовлетворительно**" 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;
- "**неудовлетворительно**" 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.

**1.3. 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.

## 2. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

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

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

#### Дополнительная литература

1. Симметрия молекул : учеб. пособ. / Р. Р. Газетдинов ; Федер. агентство по образ., ГОУ ВПО БирГСПА .— Бирск : БирГСПА, 2010 .— 83 с.
2. Квантовая химия : науч. изд. / Г. Гельман .— 2-е изд., доп. — Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2017 .— 533 с.

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

1. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://elibrary.ru/>.
2. Электронная библиотечная система «Лань» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/>.
3. Университетская библиотека онлайн biblioclub.ru [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/>.
4. Электронная библиотека УУНиТ [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://elib.bashedu.ru/>.
5. Российская государственная библиотека [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.rsl.ru/>.
6. Национальная электронная библиотека [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://xn--90ax2c.xn--p1ai/viewers/>.
7. Национальная платформа открытого образования proed.ru [Электронный ресурс]. – Режим

- доступа: <http://npoed.ru/>.
8. Электронное образование Республики Башкортостан [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://edu.bashkortostan.ru/>.
9. Информационно-правовой портал Гарант.ру [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.garant.ru/>.

### Программное обеспечение

- Office Professional Plus - Договор №0301100003620000022 от 29.06.2020, Договор № 2159-ПО/2021 от 15.06.2021, Договор №32110448500 от 30.07.2021
- Windows - Договор №0301100003620000022 от 29.06.2020, Договор № 2159- ПО/2021 от 15.06.2021, Договор №32110448500 от 30.07.2021

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

Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий	Вид занятий	Наименование оборудования, программного обеспечения
Аудитория 11(БФ)	Лекционная, Семинарская, Для курсового проектирования, Для консультаций, Для контроля и аттестации	Коммутатор d-link , источник бесперебойного питания арс, компьютеры в сборе, учебная мебель. Программное обеспечение 1. Office Professional Plus
Аудитория 12а(БФ)	Для хранения оборудования	Нетбук lenovo, учебно-методическая литература, учебно-наглядные пособия, монитор, комплект визуализации на базе canon, системный блок. Программное обеспечение 1. Office Professional Plus
Аудитория 30(БФ)	Для самостоятельной работы	Учебная мебель, компьютеры в сборе. Программное обеспечение 1. Office Professional Plus 2. Windows
Аудитория 34(БФ)	Для консультаций	Монитор, системный блок. Программное обеспечение 1. Office Professional Plus 2. Windows