

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт физики



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.



\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

*подписано электронно-цифровой подписью*

**Программа дисциплины**  
Квантовая механика молекул БЗ.ДВ.7

Направление подготовки: 011200.62 - Физика

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Аминова Р.М.

**Рецензент(ы):**

Аганов А.В. , Салихов К.М.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Савостина Л. И.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No 617818

Казань  
2018

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Аминова Р.М. Кафедра физики молекулярных систем Отделение физики, Roza.Aminova@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины "Квантовая механика молекул" является овладение современными квантовохимическими (полуэмпирическими и неэмпирическими) методами расчета пространственной структуры и физико-химических свойств молекулярных систем различной степени сложности, в основе которых лежат законы квантовой механики. Применение квантовохимических методов позволяет получать информацию о структуре молекулы и механизмах физико-химических процессов на поверхностях потенциальной энергии основного и возбужденного состояния и проводить корректную интерпретацию экспериментальных данных в оптической и ЯМР спектроскопии.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б3.ДВ.7 Профессиональный" основной образовательной программы 011200.62 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 7, 8 семестры.

Изучение данной дисциплины базируется на подготовке студентов по квантовой механике в рамках Государственного стандарта общего образования, дисциплин подготовки бакалавров по направлению 011200.62 - "Физика": Б3.Б.10 "Квантовая теория". Овладение навыками использования современных квантовохимических методов для изучения структуры и свойств молекулярных систем с целью понимания закономерностей молекулярных процессов в химической физике позволит в дальнейшем успешно реализовать себя в профессиональной деятельности в области нанопотоники, оптики, в медицинской и биологической науках.

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин (ПК-1);
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин (ПК-4);
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований (ПК-5);
ПК-6 (профессиональные компетенции)	способностью понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований (ПК-6);
ПК-7 (профессиональные компетенции)	способностью участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме (ПК-7);
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, включая знания о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук (прежде всего химии, биологии, экологии, наук о земле и человеке) (ОПК-1);

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей (ОПК-2);
ОПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией (ОПК-5);
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта (ПК-2);

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основы квантовохимических методов вычисления пространственной структуры и свойств молекул в газовой фазе;
- основы методов расчета физико-химических свойств молекулярных систем с использованием полуэмпирических и неэмпирических методов квантовой химии для молекул в газовой фазе;
- понимать механизм физических процессов, происходящих в химических реакциях;
- знать методы и подходы, позволяющие анализировать и давать теоретическую интерпретацию наблюдаемым в эксперименте оптическим и магнитно-резонансным параметрам.

2. должен уметь:

- применять квантовохимические методы для моделирования структуры молекулярных систем;
- использовать квантовохимические методы для расчетов физико-химических свойств молекул;
- Уметь работать с компьютером на уровне пользователя и обладать способностью применять полученные навыки работы с компьютерами как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности.

3. должен владеть:

- практическими навыками в области построения структуры молекулы в газовой фазе;
- навыками расчетов структурных, термодинамических, физико-химических характеристик молекул, уметь интерпретировать экспериментальные данные в ЯМР спектроскопии, в оптической и молекулярной спектроскопии и фотохимии;
- владеть основными методами, способами и средствами получения, хранения и переработки информации, владеть навыками работы с компьютером как средством управления информацией. Владеть навыками работы с учебной и научной литературой.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

- к решению задач, связанных с атомно-молекулярным строением вещества, работать с современными образовательными и информационными технологиями.

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 7 зачетных(ые) единиц(ы) 252 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 7 семестре; экзамен в 8 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение в курс квантовой механики молекул. Литература.	7	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Термы многоэлектронных атомов и правила Гунда. Атом в электрическом и магнитном полях.	7	2	2	2	0	
3.	Тема 3. Таблица микросостояний атома углерода. Атомы углерода и натрия в магнитном поле.	7	3	2	0	0	
4.	Тема 4. Уравнение Шредингера для молекулы. Адиабатическое приближение.	7	4	2	2	0	
5.	Тема 5. Строение и термы двухатомных молекул.	7	5	2	2	0	
6.	Тема 6. Таблица микросостояний для молекулы кислорода.	7	6	2	2	0	
7.	Тема 7. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока.	7	7	2	4	0	Реферат
8.	Тема 8. Молекулы с замкнутыми и открытыми оболочками.	7	8	2	4	0	Реферат

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
9.	Тема 9. Понятие электронной корреляции. Методы учета электронной корреляции.	7	9	2	2	0	
10.	Тема 10. Методы теории возмущений для учета электронной корреляции	7	10	2	0	0	Устный опрос
11.	Тема 11. Понятие базиса в квантовой химии. Типы базисовых наборов.	7	11	2	4	0	Контрольная работа
12.	Тема 12. Особенности базисных наборов при расчетах вандерваальсовых молекул.	7	12	2	2	0	Устный опрос
13.	Тема 13. Проблема многоцентровых интегралов в квантовой химии.	7	13	2	3	0	Контрольная работа
14.	Тема 14. Методы вычисления двухцентровых интегралов с функциями Слетера.	7	14	2	3	0	Контрольная работа
15.	Тема 15. Проблема многоцентровых интегралов в квантовой химии. Методы вычисления интегралов на гауссовых волновых функциях. Интегралы перекрытия.	7	15	2	2	0	
16.	Тема 16. Полуэмпирические методы квантовой химии.	7	16	2	0	0	
17.	Тема 17. Метод Хюккеля. Расширенный метод Хюккеля.	7	17	2	2	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
18.	Тема 18. Комплекс программ для полуэмпирических и неэмпирических расчетов физико-химических свойств молекул.	7	18	2	2	0	
19.	Тема 19. Молекулярные аспекты симметрии. Элементы симметрии. Операции симметрии.	8	1	2	4	0	Контрольная работа
20.	Тема 20. Таблицы характеристик для точечных групп $C_{2v}$ и $C_{3v}$ .	8	2	2	4	0	
21.	Тема 21. Полуэмпирические методы квантовой химии.	8	3	2	0	0	
22.	Тема 22. Групповые и молекулярные орбитали комплекса $PtCl_4^{2-}$ .	8	4	2	4	0	
23.	Тема 23. Молекулярные орбитали молекулы бензола	8	5	2	4	0	
24.	Тема 24. Вероятность спектральных переходов. Разрешенные и запрещенные переходы.	8	6	2	2	0	
25.	Тема 25. Теория функционала плотности.	8	7	2	0	0	
26.	Тема 26. Уравнения Кона Шэма. Функционалы в теории DFT.	8	8	2	4	0	Реферат
27.	Тема 27. Методы расчета возбужденных состояний молекул. Метод CIS	8	9	2	2	0	Письменная работа

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
28.	Тема 28. Электрические и магнитные свойства молекул и квантовая химия.	8	10	2	2	0	Контрольная работа
29.	Тема 29. Проблема локализации и делокализации в квантовой химии.	8	11	2	0	0	
30.	Тема 30. Локализация и концепция гибридизации в свете современных представлений.	8	12	2	0	0	
31.	Тема 31. Методы квантовой химии в расчетах кристаллических структур. Теория кристаллического поля и поля лигандов.	8	13	2	2	0	Устный опрос
32.	Тема 32. Методы молекулярной динамики	8	14	2	2	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	Зачет
	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	Экзамен
	Итого			64	66	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

##### Тема 1. Введение в курс квантовой механики молекул. Литература.

###### *лекционное занятие (2 часа(ов)):*

Предсказательные возможности современной квантовой химии, примеры. Неклассические молекулы. Связь между строением и свойствами молекул в биологии и медицине  
Предсказательные возможности современной квантовой химии, примеры. Неклассические молекулы. Связь между строением и свойствами молекул в биологии и медицине

##### Тема 2. Термы многоэлектронных атомов и правила Гунда. Атом в электрическом и магнитном полях.

###### *лекционное занятие (2 часа(ов)):*

Термы многоэлектронных атомов первого ряда таблицы Менделеева. Атомы углерода и натрия в магнитном поле. Термы многоэлектронных атомов первого ряда для основного состояния атома таблицы Менделеева.

###### *практическое занятие (2 часа(ов)):*

Эффект Зеемана и методы ЭПР и ЯМР. Константа сверхтонкого взаимодействия, спиновые ловушки.

##### Тема 3. Таблица микросостояний атома углерода. Атомы углерода и натрия в магнитном поле.

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Термы многоэлектронных атомов первого ряда таблицы Менделеева.

**Тема 4. Уравнение Шредингера для молекулы. Адиабатическое приближение.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Вариационный метод Ритца. Вековое уравнение. Порядок векового уравнения. Вариационный метод. Вековое уравнение

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Решение векового уравнения для простых молекулярных систем. Примеры решения векового уравнения для конкретных систем. Порядок векового уравнения. Число занятых молекулярных орбиталей в открытых и замкнутых системах.

**Тема 5. Строение и термы двухатомных молекул.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Молекулярный ион водорода в рамках метода МО ЛКАО. Теорема Гельмана-Фейнмана. Теорема вириала. Молекулярный ион водорода в рамках метода МО ЛКАО. Теорема Гельмана-Фейнмана. Теорема вириала. Энергия диссоциации, преддиссоциации, фотодиссоциации

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Доказательство теоремы вириала с использованием сферических координат. Решение векового уравнения для молекулярного иона водорода в рамках метода МО ЛКАО. Вид необходимых интегралов.

**Тема 6. Таблица микросостояний для молекулы кислорода.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Синглетный кислород. Фотодинамический эффект

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Построение термов молекулы кислорода. Терм синглетного кислорода.

**Тема 7. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Вывод уравнений Хартри-Фока. Кулоновский и обменный интегралы, их физический смысл. Детерминант Слетера и принцип Паули. Энергия двухэлектронной системы с детерминантной волновой функцией Слетера.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Двухэлектронная задача. Детерминанты Слетера для молекулы водорода. Энергия двухэлектронной системы с детерминантной волновой функцией Слетера.

**Тема 8. Молекулы с замкнутыми и открытыми оболочками.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока-Рутана. Теорема Купманса и фотоэлектронные спектры молекул.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Интегралы для молекулы водорода в методе Хартри-Фока-Рутана.

**Тема 9. Понятие электронной корреляции. Методы учета электронной корреляции.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Методы учета электронной корреляции. Конфигурационное взаимодействие (КВ).

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Полное активное пространство. Учет КВ для молекулы водорода.

**Тема 10. Методы теории возмущений для учета электронной корреляции**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Методы теории возмущений Меллера-Плесе (MP2) для учета электронной корреляции

**Тема 11. Понятие базиса в квантовой химии. Типы базисовых наборов.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Типы базисов в квантово-химических расчетах. Двухэкспонентный базис. Учет поляризации. Валентно-расщепленный базис. Диффузные функции.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Минимальный и расширенный базис. Конкретные примеры. Суперпозиционная ошибка. Методы ECP (Effective core potential).

**Тема 12. Особенности базисных наборов при расчетах вандерваальсовых молекул.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Особенности базисных наборов при расчетах вандерваальсовых молекул, а также в молекулах с тяжелыми элементами

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Учет суперпозиционной ошибки базисного набора для определения энергии взаимодействия ван-дер-ваальсовых молекул.

**Тема 13. Проблема многоцентровых интегралов в квантовой химии.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Методы вычисления интегралов на слетеровских и гауссовых волновых функциях. Методы вычисления интегралов на слетеровских и гауссовых волновых функциях.

**практическое занятие (3 часа(ов)):**

Расчет интегралов для молекулы водорода. Вычисление необходимых интегралов при решении уравнения Шредингера для молекулы водорода.

**Тема 14. Методы вычисления двухцентровых интегралов с функциями Слетера.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Проблема многоцентровых интегралов и методы расчета.

**практическое занятие (3 часа(ов)):**

Некоторые специфические методы вычисления кулоновских и обменных интегралов.

**Тема 15. Проблема многоцентровых интегралов в квантовой химии. Методы вычисления интегралов на гауссовых волновых функциях. Интегралы перекрывания.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Методы вычисления интегралов на гауссовых волновых функциях

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Расчеты интегралов перекрывания с функциями Слетера и с гауссовыми функциями

**Тема 16. Полуэмпирические методы квантовой химии.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Возможности и ограничения полуэмпирических методов квантовой химии

**Тема 17. Метод Хюккеля. Расширенный метод Хюккеля.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Методы Хюккеля для  $\pi$ -электронных систем. Примеры. (анион-радикалы бензола, бутадиена, нафталина). Относительная стабильность циклических полиенов.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Определение размера векового уравнения, числа занятых и свободных молекулярных орбиталей для конкретных молекулярных систем.

**Тема 18. Комплекс программ для полуэмпирических и неэмпирических расчетов физико-химических свойств молекул.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Описание и демонстрация возможностей программ для полуэмпирических и неэмпирических расчетов физико-химических свойств молекул

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Знакомство с программой WinMoras и HyperChem.

**Тема 19. Молекулярные аспекты симметрии. Элементы симметрии. Операции симметрии.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Некоторые сведения из теории групп. Точечные группы симметрии.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Написать таблицы умножения для точечных групп  $C_{2v}$  и  $C_{3v}$ . Ознакомление с точечными группами симметрии для различных молекулярных систем.

**Тема 20. Таблицы характеров для точечных групп  $C_{2v}$  и  $C_{3v}$ .**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Характер. Приводимые и неприводимые представления.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Приводимые и неприводимые представления для молекулы воды. Упрощение векового уравнения для молекулы воды

**Тема 21. Полуэмпирические методы квантовой химии.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Возможности и ограничения. Относительная стабильность циклических полиенов.

**Тема 22. Групповые и молекулярные орбитали комплекса  $PtCl_4^{2-}$ .**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Классификация атомных орбиталей платины по типам симметрии. Принцип максимального перекрывания

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Рассчитать групповые и молекулярные орбитали комплекса  $PtCl_4^{2-}$ .

**Тема 23. Молекулярные орбитали молекулы бензола**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Упрощение векового уравнения для молекулы бензола

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Найти характеры приводимого представления для точечной группы симметрии молекулы бензола с учетом  $\pi$ -орбиталей, разложить на неприводимы представления. Найти вид молекулярных орбиталей. Ортогонализировать молекулярные орбитали бензола. Используя метод Хюккеля, рассчитать энергии МО.

**Тема 24. Вероятность спектральных переходов. Разрешенные и запрещенные переходы.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Используя точечную группу симметрии  $C_{3v}$ , в рамках метода Хюккеля рассчитать групповые молекулярные орбитали для молекулы аммиака. Сопоставить результаты с моделью гиперконъюгации

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Для молекулы воды рассчитать групповые молекулярные орбитали, используя точечную группу симметрии  $C_{2v}$ . Определить разрешенные и запрещенные

**Тема 25. Теория функционала плотности.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Теорема Хоенберга-Кона. Вариационный принцип Кона-Шэма.

**Тема 26. Уравнения Кона Шэма. Функционалы в теории DFT.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Уравнения Кона Шэма для простейшей молекулы. Сравнение с методом самосогласованного поля Хартри

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Для функционалы в теории DFT : приближение локальной плотности, градиентные функционалы

**Тема 27. Методы расчета возбужденных состояний молекул. Метод CIS**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Возбужденные состояния молекул в неэмпирических расчетах.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Расчет возбужденных состояний молекул в неэмпирической программе Гауссиан.

**Тема 28. Электрические и магнитные свойства молекул и квантовая химия.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Поляризуемость молекул (теория возмущений и вариационный метод). Гиперполяризуемость

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Получить выражение для поляризуемости молекулы в рамках теории возмущений и в рамках вариационного метода.

**Тема 29. Проблема локализации и делокализации в квантовой химии.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Методы локализации . История вопроса. Канонические и локализованные молекулярные орбитали. Методы локализации (Бойса, Руденберга, Магнаско-Перико). 8

**Тема 30. Локализация и концепция гибридизации в свете современных представлений.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

концепция гибридизации в свете современных представлений.

**Тема 31. Методы квантовой химии в расчетах кристаллических структур. Теория кристаллического поля и поля лигандов.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Периодические структуры. Граничные условия.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Применение метода плоских волн для простых молекул

**Тема 32. Методы молекулярной динамики**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Классическая и неэмпирическая молекулярная динамика

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Изучение динамических процессов на компьютере

#### 4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
7.	Тема 7. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока.	7	7	подготовка к реферату	8	реферат
8.	Тема 8. Молекулы с замкнутыми и открытыми оболочками.	7	8	подготовка к реферату	8	реферат
10.	Тема 10. Методы теории возмущений для учета электронной корреляции	7	10	подготовка к устному опросу	3	устный опрос
11.	Тема 11. Понятие базиса в квантовой химии. Типы базисовых наборов.	7	11	подготовка к контрольной работе	8	контрольная работа

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
12.	Тема 12. Особенности базисных наборов при расчетах вандерваальсовых молекул.	7	12	подготовка к устному опросу	3	устный опрос
13.	Тема 13. Проблема многоцентровых интегралов в квантовой химии.	7	13	подготовка к контрольной работе	3	контрольная работа
14.	Тема 14. Методы вычисления двухцентровых интегралов с функциями Слетера.	7	14	подготовка к контрольной работе	3	контрольная работа
19.	Тема 19. Молекулярные аспекты симметрии. Элементы симметрии. Операции симметрии.	8	1	подготовка к контрольной работе	15	контрольная работа
26.	Тема 26. Уравнения Кона Шэма. Функционалы в теории DFT.	8	8	подготовка к реферату	10	реферат
27.	Тема 27. Методы расчета возбужденных состояний молекул. Метод CIS	8	9	подготовка к письменной работе	8	письменная работа
28.	Тема 28. Электрические и магнитные свойства молекул и квантовая химия.	8	10	подготовка к контрольной работе	5	контрольная работа
31.	Тема 31. Методы квантовой химии в расчетах кристаллических структур. Теория кристаллического поля и поля лигандов.	8	13	подготовка к устному опросу	12	устный опрос
	Итого				86	

### 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Освоение дисциплины "Квантовая механика молекул" предполагает использование в учебном процессе как традиционных (лекции, практические занятия с использованием методических материалов и компьютерной техники), так и инновационных образовательных технологий с применением активных и интерактивных форм проведения занятий: выполнение ряда практических заданий с использованием современных мощных программных комплексов и электронных баз данных; которые студенты должны освоить, мультимедийных программ, включающих подготовку и выступления студентов на семинарских занятиях с фото-, аудио- и видеоматериалами по предложенной тематике. Используются такие образовательные технологии:

- проверка домашних заданий,
- проверка решений предложенных задач по изучаемому материалу на компьютерах;
- постановка перед студентами вопроса по теме, которая еще только будет изучаться, и студенты должны дать ответ, основываясь на интуиции, а затем этот вопрос подробно изучается.

## **6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

**Тема 1. Введение в курс квантовой механики молекул. Литература.**

**Тема 2. Термы многоэлектронных атомов и правила Гунда. Атом в электрическом и магнитном полях.**

**Тема 3. Таблица микросостояний атома углерода. Атомы углерода и натрия в магнитном поле.**

**Тема 4. Уравнение Шредингера для молекулы. Адиабатическое приближение.**

**Тема 5. Строение и термы двухатомных молекул.**

**Тема 6. Таблица микросостояний для молекулы кислорода.**

**Тема 7. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока.**

реферат , примерные темы:

Методы самосогласованного поля в неэмпирических расчетах

**Тема 8. Молекулы с замкнутыми и открытыми оболочками.**

реферат , примерные темы:

Сравнение результатов расчетов свойств молекул для замкнутых и открытых оболочек

**Тема 9. Понятие электронной корреляции. Методы учета электронной корреляции.**

**Тема 10. Методы теории возмущений для учета электронной корреляции**

устный опрос , примерные вопросы:

Различие методов учета корреляции по теории возмущений и методов КВ

**Тема 11. Понятие базиса в квантовой химии. Типы базисовых наборов.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Орбитали слейтеровского и гауссова типа. Минимальный и расширенный базис.

Двухэкспонентный базис.

**Тема 12. Особенности базисных наборов при расчетах вандерваальсовых молекул.**

устный опрос , примерные вопросы:

Необходимость учета суперпозиционной ошибки при расчете энергии взаимодействия в комплексах.

**Тема 13. Проблема многоцентровых интегралов в квантовой химии.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Вычисление необходимых интегралов при решении уравнения Шредингера для молекулы водорода.

**Тема 14. Методы вычисления двухцентровых интегралов с функциями Слетера.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Сфероидальные координаты. Интегралы перекрывания для молекулы водорода

**Тема 15. Проблема многоцентровых интегралов в квантовой химии. Методы вычисления интегралов на гауссовых волновых функциях. Интегралы перекрывания.**

**Тема 16. Полуэмпирические методы квантовой химии.**

**Тема 17. Метод Хюккеля. Расширенный метод Хюккеля.**

**Тема 18. Комплекс программ для полуэмпирических и неэмпирических расчетов физико-химических свойств молекул.**

**Тема 19. Молекулярные аспекты симметрии. Элементы симметрии. Операции симметрии.**

контрольная работа , примерные вопросы:

1. Указать элементы симметрии для конкретных молекулярных систем. 2. Написать таблицу умножения для соответствующих молекулярных систем.

**Тема 20. Таблицы характеров для точечных групп  $C_{2v}$  и  $C_{3v}$ .**

**Тема 21. Полуэмпирические методы квантовой химии.**

**Тема 22. Групповые и молекулярные орбитали комплекса  $PtCl_4^{2-}$ .**

**Тема 23. Молекулярные орбитали молекулы бензола**

**Тема 24. Вероятность спектральных переходов. Разрешенные и запрещенные переходы.**

**Тема 25. Теория функционала плотности.**

**Тема 26. Уравнения Кона Шэма. Функционалы в теории DFT.**

реферат , примерные темы:

Функционалы в теории DFT.

**Тема 27. Методы расчета возбужденных состояний молекул. Метод CIS**

письменная работа , примерные вопросы:

Методы CIS в программе гауссиан

**Тема 28. Электрические и магнитные свойства молекул и квантовая химия.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Диамагнитное экранирование в двухатомной молекуле

**Тема 29. Проблема локализации и делокализации в квантовой химии.**

**Тема 30. Локализация и концепция гибридизации в свете современных представлений.**

**Тема 31. Методы квантовой химии в расчетах кристаллических структур. Теория кристаллического поля и поля лигандов.**

устный опрос , примерные вопросы:

Определить уровни энергии d-орбиталей для кристаллических полей различных симметрий.

**Тема 32. Методы молекулярной динамики**

**Тема . Итоговая форма контроля**

**Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету и экзамену:

**ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ ПО КУРСУ "КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА МОЛЕКУЛ"**

Семестр 7. Практических 36 часов

Практическое занятие ♦ 1. Электронные термы атомов первого периода в магнитном поле. Электронные термы атомов, содержащих редкоземельные элементы. (2 часа).

Коллоквиум ♦ 1. Коллоквиум по электронным термам легких и тяжелых атомов.

Практическое занятие ♦ 2. Интегралы для молекулы водорода в теории Хартри-Фока-Рутана. (4 часа).

Практическое занятие ♦ 3. Детерминантные волновые функции. Интегралы на детерминантных волновых функциях (4 часа)

Коллоквиум ♦ 2. Коллоквиум по детерминантным волновым функциям.

Примерные вопросы к зачету:

Что такое электронная корреляция?

Как учитывается электронная корреляция в методах Хартри-Фока и в теории функционала плотности ?

Какие методы используются для учета межмолекулярных взаимодействий в растворах?

Что такое "энергия сольватации", из каких вкладов состоит энергия сольватации?

Что такое метод самосогласованного реактивного поля (Self-Consistent Reaction Field) (SCRFF) ?

В чем суть метода "Поляризованная континуальная модель" (PCM)?

Какие базисные наборы Вы используете при расчете сложных систем? Чем отличаются они от базисных наборов Слетера и гауссовых функций?

Критические точки на поверхности потенциальной энергии (ППЭ). Кривизна поверхности. Гессиан.

В чем заключается проблема многоцентровых интегралов в квантовой химии? Продемонстрируйте на уравнениях Хартри-Фока-Рутана.

Запишите уравнение Хартри, уравнение Хартри-Фока и уравнение Кона-Шэма. В чем их различие?

Вандерваальсова молекула. Специфические и неспецифические межмолекулярные взаимодействия

Примерные вопросы к экзамену:

Билет 1

1. Что такое электронная корреляция?

Какие методы существуют для учета электронной корреляции в теории Хартри-Фока и в теории функционала плотности ?

2. В чем суть метода "Поляризованная континуальная модель" (PCM)?

Билет 2

1. Что такое "энергия сольватации", из каких вкладов состоит энергия сольватации? Какие методы существуют для учета межмолекулярных взаимодействий в растворах?

2. Базисные наборы, которые используются в методах Хартри-Фока и при расчете физико-химических свойств в конденсированных средах.

Билет 3

1. Запишите уравнение Хартри, уравнение Хартри-Фока и уравнение Кона-Шэма. Подробнее опишите суть методов.

2. Вандерваальсова молекула. Специфические и неспецифические межмолекулярные взаимодействия.

Билет 4

1. Критические точки на поверхности потенциальной энергии (ППЭ). Кривизна поверхности. Гессиан.

2. Уравнения Хартри-Фока-Рутана. Уравнения Кона-Шэма. Подробнее опишите суть методов.

Билет 5

1. Электронные уровни двухатомной молекулы. Фотодинамический эффект. Триплетный и синглетный кислород.

2. Метод самосогласованного реактивного поля (Self-Consistent Reaction Field) (SCRFF).

Билет 6

1. Основные идеи метода Кона-Шэма в теории функционала плотности.

2. Уравнение Рутана. Проблема многоцентровых интегралов в квантовой химии (на примере молекулы кислорода).

Билет 7

1. Запишите гамильтониан, волновую функцию и вид интегралов, которые необходимо рассчитать в методе Рутана для двухатомной молекулы.
2. Что такое функционал в теории функционала плотности.

#### Билет 8

1. В чем вы видите преимущества теории функционала плотности по сравнению с методами Хартри-Фока-Рутана?
2. Какие базисные наборы Вы используете при расчете сложных систем? Чем отличаются они от базисных наборов Слетера и гауссовых функций?

#### Билет 9

1. Электронные заселенности по Малликену. Как рассчитываются заряды на атомах в полуэмпирических и в неэмпирических методах.
2. Что такое "конфигурация"? Опишите детали метода конфигурационного взаимодействия для молекулы водорода.

Что такое диффузные функции, поляризованный базис, валентно-расщепленный базис? Поясните на примере базисного набора 6-311++G(d,p).

Запишите выражение для полной электронной энергии реальной системы в методе функционала плотности. Что такое обменно-корреляционная энергия?

Что такое "конфигурация"? В чем суть метода конфигурационного взаимодействия?

Электронные уровни двухатомной молекулы. Фотодинамический эффект. Триплетный и синглетный кислород.

Электронные заселенности по Малликену. Как рассчитываются заряды на атомах.

Практическое занятие ♦ 4. Проблема многоцентровых интегралов в квантовой химии. Методы вычисления интегралов на гауссовых волновых функциях. Расчет интегралов перекрывания с гауссовыми функциями. ((4 часа))

Практическое занятие ♦ 5. Проблема многоцентровых интегралов в квантовой химии. Методы вычисления интегралов на волновых функциях слейтеровского типа. Сфероидальные координаты. Расчет интегралов перекрывания с функциями Слейтера. (4 часа)

Коллоквиум ♦ 3. Интегралы в теории Хартри-Фока-Рутана.

Практическое занятие ♦ 6. Некоторые специфические методы вычисления кулоновских и обменных интегралов. Вычисление интегралов двухэлектронного взаимодействия. (4 часа)

Практическое занятие ♦ 7. Методы учета корреляции. Конфигурационное взаимодействие в рамках полуэмпирического метода на примерах малых молекул. (4 часа).

Практическое занятие ♦ 8. Полуэмпирические методы квантовой химии. (2 часа)

Практическое занятие ♦ 9. Неэмпирические методы квантовой химии. (4 часа)

Коллоквиум ♦ 4. Особенности описания данных для расчетов с использованием полуэмпирических и неэмпирических методов в квантовой химии.

Практическое занятие ♦ 10. Применение методов Хюккеля и расширенного метода Хюккеля для некоторых малых молекул. Вид векового уравнения. Методы решения. (4 часа)

Коллоквиум ♦ 5. Применение полуэмпирических методов (МОХ и РМХ) для решения векового уравнения.

Семестр 8. Практических 30 часов.

Практическое занятие ♦ 1. Классификация электронных состояний молекул по типам симметрии. Групповые и молекулярные орбитали молекулы комплекса PtCl<sub>4</sub><sup>2-</sup>. Классификация атомных орбиталей платины по типам симметрии. Принцип максимального перекрытия в квантовой химии. (4 часа)

Практическое занятие ♦ 2. Получение симметризованных молекулярных орбиталей для молекул воды, аммиака, метана, формальдегида. (4 часа)

Коллоквиум ♦ 1. Учет симметрии в расчетах полуэмпирическими методами.

Практическое занятие ♦ 3. Классификация электронных состояний молекулы бензола по типам симметрии. Вычисление молекулярных орбиталей молекулы бензола, используя приближения метода Хюккеля. (4 часа)

Коллоквиум ♦ 4. Симметризованные орбитали в квантовохимических расчетах молекул.

Практическое занятие ♦ 5. Классификация нормальных колебаний молекул Разрешенные и запрещенные переходы в молекулах воды, аммиака, метана, формальдегида. (4 часа)

Коллоквиум ♦ 5. Использование симметрии в квантовохимических расчетах.

Практическое занятие ♦ 6. Канонические и локализованные молекулярные орбитали молекул воды, метана, фосфина, формальдегида. Гибридизация. (4 часа)

Практическое занятие ♦ 7. Поляризуемость молекул (теория возмущений и вариационный метод). Магнитная восприимчивость. Диамагнитное экранирование магнитных ядер. (4 часа)

Практическое занятие ♦ 8. Квантовохимический расчет волновой функции двухатомной молекулы, интеграла перекрытия и нормировки, магнитной восприимчивости и диамагнитного экранирования атомов в двухатомной молекуле (самостоятельная работа). (6 часов)

Коллоквиум ♦ 6. По результатам расчетов свойств двухатомных молекул (связей).

САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ (СРС) включает следующие виды работ:

- изучение теоретического лекционного материала;
- проработка теоретического материала (конспекты лекций, основная и дополнительная литература);
- овладение программными средствами по построению пространственной структуры молекул, моделированию молекулярных комплексов разного размера;
- приобретение навыков в составлении компьютерных заданий для квантовохимических расчетов разного уровня сложности с использованием современных программных комплексов на компьютерах кафедры химической физики и института физики (3 этаж физического корпуса).

### 7.1. Основная литература:

1. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: Учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 2-е изд. (эл.). - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. - 2012.-496 с. - Издательство "Лань" Электронно-библиотечная система.

[http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=3150](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3150)

2. Аминова Р.М. Основы современной квантовой химии: учебное пособие для студентов и магистрантов физ. и хим. фак. Казан. гос. ун-та / Р.М. Аминова. - Казань, 2004. - 105 с.

3. Аминова Р.М. Поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Квантовохимические методы анализа ППЭ: учебное пособие / Р.М. Аминова. - Казань: Казанский государственный университет, 2009. - 124 с.

4. Федотов М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии (растворы и жидкости) / М.А. Федотов. -М.: Физматлит, 2009. - 383 с.

## 7.2. Дополнительная литература:

1. Молекулярная спектроскопия биологических сред : учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по направлениям подгот. дипломир. специалистов "Биомед. техника" и "Биомед. инженерия" / В. М. Сидоренко. ? М. : Высш. шк., 2004. ? 190 с.
2. Молекулярное моделирование : теория и практика / Х.-Д. Хельтье [и др.] ; под ред. В. А. Палюлина и Е. В. Радченко ; пер. с англ. А. А. Олиференко [и др.]. ? Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2009. ? 318 с.
3. Молекулярная и нанофармакология / Н. Л. Шимановский, М. А. Епинетов, М. Я. Мельников. ? Москва : Физматлит, 2010. ? 623 с.

## 7.3. Интернет-ресурсы:

Задачи по курсу - [http://www.ksu.ru/f6/k7/bin\\_files/92.pdf](http://www.ksu.ru/f6/k7/bin_files/92.pdf)

Задачи по курсу - [http://www.ksu.ru/f6/k7/bin\\_files/90.pdf](http://www.ksu.ru/f6/k7/bin_files/90.pdf)

Задачи по курсу - [http://www.ksu.ru/f6/k7/bin\\_files/91.pdf](http://www.ksu.ru/f6/k7/bin_files/91.pdf)

Методические пособия Аминовой Р.М. - <http://www.ksu.ru/f6/k7/index.php?id=13&idm=12&num=1>

Расчеты электронного строения и свойств молекул полуэмпирическими методами квантовой химии. Методическое пособие для работы на компьютере - [http://www.ksu.ru/f6/k7/bin\\_files/\\_!30.pdf](http://www.ksu.ru/f6/k7/bin_files/_!30.pdf)

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Квантовая механика молекул" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Аудитория с мультимедиапроектором, ноутбуком и экраном

Для работы со студентами кафедра химической физики оснащена комплексом персональных компьютеров на кафедре химической физики.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011200.62 "Физика" и профилю подготовки не предусмотрено.

Автор(ы):

Аминова Р.М. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Аганов А.В. \_\_\_\_\_

Салихов К.М. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.