

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МУРМАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

АПАТИТСКИЙ ФИЛИАЛ

**Методические указания к выполнению самостоятельных работ**

**По дисциплине:** Б1В.03ДВ.02.02 Методы квантово-химических расчетов  
указывается цикл (раздел) ОП, к которому относится дисциплина, название дисциплины

**для направления подготовки (специальности)** 04.03.01 Химия  
код и наименование направления подготовки (специальности)

Неорганическая химия и химия координационных соединений  
наименование профиля /специализаций/образовательной программы

**Квалификация выпускника, уровень подготовки** бакалавр  
(указывается квалификация (степень) выпускника в соответствии с ФГОС ВО)

**Кафедра - разработчик:** химии и строительного материаловедения  
название кафедры - разработчика рабочей программы

**Разработчик(и)** О.Р. Стародуб, доцент, к.х.н.  
(ФИО, должность, ученая степень, (звание))

**Апатиты  
2019**

## Пояснительная записка

1. Методические указания составлены на основе ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденного приказом Минобрнауки РФ от 17 июля 2017 года, № 671, учебного плана в составе ОП по направлению подготовки 04.03.01 Химия, профилю «Неорганическая химия и химия координационных соединений».

### 2. Цели и задачи учебной дисциплины (модуля).

**Целью дисциплины** (модуля) «Методы квантово-химических расчетов» является подготовка обучающегося в соответствии с квалификационной характеристикой бакалавра и рабочим учебным планом направления 04.03.01 Химия, что предполагает ознакомление обучающихся с теорией движения материи в микромире, когда изучаемые объекты представляют собой электроны, атомы, молекулы и их малые ансамбли, к описанию движения которых не применимы методы классической механики

**Задачей дисциплины** является освоение студентами следующих основных понятий:

- особенности поведения частиц в микромире, корпускулярно-волновой дуализм, принцип неопределенности Гейзенберга;
- основные постулаты квантовой механики, предпосылки их появления, несовместимость с принципами классической механики и согласованность обоих подходов в предельном случае;
- уравнение Шредингера как уравнение движения в микромире, способы его решения. Стационарное уравнение Шредингера. Полярные координаты;
- функция состояния системы, вероятностный характер получаемый с её помощью информации;
- понятие операторов квантовой механики. Собственные функции и собственные значения операторов; теория химической связи в молекулах с позиций квантовой теории;
- основные подходы решения квантово-химических задач, включая молекулы химических соединений;
- общие принципы упрощения векового уравнения при решении квантово-химических задач;
- решение квантово-химических задач в тг-приближении простым методом Хюккеля. Порядок химической связи и плотности зарядов на атомах.

### 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине «Методы квантово-химических расчетов»

Процесс изучения дисциплины «Методы квантово-химических расчетов» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия:

**ПК-1-г** Способность выбирать технические средства и методы испытаний для решения технологических задач, поставленных специалистом более высокой квалификации;

**ПК-2-г** Способность осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения, проводить паспортизацию товарной продукции

Результаты формирования компетенций и планируемые результаты обучения

представлены в таблице 1.

**Таблица 1 – Планируемые результаты обучения**

№ п/п	Код компетенции	Компоненты компетенции, степень их реализации	Результаты обучения
1	<p><b>ПК-1-т</b> Способность выбирать технические средства и методы испытаний для решения технологических задач, поставленных специалистом более высокой квалификации;</p>	<p>Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется полностью</p>	<p><b>Знать:</b> основы применения численных методов для решения квантово-химических задач моделирования систем и процессов;  <b>Уметь:</b> использовать специализированное ПО (GAMESS, ChemDraw) для решения квантово-химических задач и задач обработки данных квантово-химического эксперимента;                      - представлять полученные экспериментальные данные в виде отчетов, графиков и т.д.                      - владеть компьютерными технологиями обработки экспериментальных данных, пользоваться средствами электронной почты для делового общения;                      - определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения;                      - понимать принципы работы современной научной аппаратуры;  <b>Владеть:</b> современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов при проведении научных исследований  <i><b>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</b></i>                      ПК-1-т-1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИОКР                      ПК-1-т-2 Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИОКР                      ПК-1-т-3. Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИОКР</p>
2	<p><b>ПК-2-т</b> Способность осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения, проводить</p>	<p>Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется полностью</p>	<p><b>Знать:</b> основы применения численных методов для решения квантово-химических задач моделирования систем и процессов;  <b>Уметь:</b> использовать специализированное ПО (GAMESS, ChemDraw) для решения квантово-химических задач и задач обработки данных квантово-химического эксперимента;                      - представлять полученные экспериментальные данные в виде отчетов, графиков и т.д.                      - владеть компьютерными технологиями обработки экспериментальных данных,</p>

	паспортизацию товарной продукции		<p>пользоваться средствами электронной почты для делового общения;</p> <p>- определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения;</p> <p>- понимать принципы работы современной научной аппаратуры;</p> <p><b>Владеть:</b> современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов при проведении научных исследований</p> <p><b>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</b></p> <p>ПК-2-т-1. Выполняет стандартные операции на высокотехнологическом оборудовании для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции химического производства</p> <p>ПК-2-т-2. Составляет протоколы испытаний, паспорта химической продукции, отчеты о выполненной работе по заданной форме</p>
--	----------------------------------	--	--

**Таблица 2 - Тематический план**

№ раздела	Содержание разделов, тем дисциплины для самостоятельной работы	Количество часов
1	2	3
1.	Основные методы приближенного решения уравнения Шредингера.	2
2.	Метод самосогласованного поля Хартри.	2
3.	Метод Хартри-Фока.	2
4.	Приближение Борна—Оппенгеймера.	2
5.	Метод валентных связей.	2
6.	Метод молекулярных орбиталей.	2
7.	Приближение линейных комбинаций атомных орбиталей. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. МО гомоядерных двухатомных молекул. Электронные конфигурации гомоядерных молекул. МО гетероядерных двухатомных молекул.	4
8.	Полуэмпирические методы расчета. Основные требования к полуэмпирическим методам.	2
9.	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Расчет энергий МО: циклобутadiен, бензол, этилен, циклические полиены, молекулы с гетероатомами, полициклоароматические соединения.	2
10.	Базисные ряды атомных орбиталей. Слетеровские функции. Расщепленные валентные орбитали. Эффективные потенциалы остова. Критерии сходимости.	2
11.	Визуализация пространственной структуры молекул. Редактирование структурных химических формул в программе ChemDraw. Визуализация молекулярных структур с использованием программы Chem3D.	3
12.	Знакомство с базами данных по спектроскопии и термодинамическим характеристикам соединений различных классов.	2
	<b><u>Всего часов:</u></b>	<b>27</b>

## Список рекомендуемой литературы

№ п/п	Название учебников, учебных пособий и других источников	Авторы (под ред.)	Издательство	Год издания
1	2	3	4	5
<b>Основная:</b>				
1.	Лекции по квантовой механике и квантовой химии: учебное пособие по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» для студентов специальности 020101.65 Химия»	О.Р. Стародуб	Мурманский государственный технический университет	2012
<b>Дополнительная:</b>				
2.	Квантовая механика и квантовая химия.	Н.Ф. Степанов	Москва, «Мир», Изд-во Моск. Ун-та	2001
3.	Квантовая механика :учебник <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/I/SBN9785927507061.html?SSr=010134171b106b0b2512518">http://www.studentlibrary.ru/book/I/SBN9785927507061.html?SSr=010134171b106b0b2512518</a>	Ведринский Р.В	Изд-во ЮФУ	2009
4.	Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие <a href="https://e.lanbook.com/book/113631">https://e.lanbook.com/book/113631</a>	Барановский В.И.	Издательство "Лань"	2019

### Рекомендации к выполнению самостоятельных работ

**1. Тема: Основные методы приближенного решения уравнения Шредингера.**

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. Решение уравнения Шредингера для атома водорода.
2. Способы приближенного решения уравнения Шредингера.
3. Методы теории возмущений и вариационные методы.

#### Рекомендуемая литература

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].

**2. Тема: Метод самосогласованного поля Хартри.**

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. Принцип метода самосогласованного поля Хартри.
2. Физическая идея метода Хартри

#### Рекомендуемая литература

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].

**3. Тема: Метод Хартри-Фока.**

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. Принцип метода Хартри-Фока.
2. Роль Д. Хартри и В. А. Фока в создании метода.
3. Области применения метода Хартри-Фока.

#### Рекомендуемая литература

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].

#### 4. Тема: Приближение Борна—Оппенгеймера.

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. Принцип приближения Борна—Оппенгеймера.
2. Полная энергия в приближении Борна—Оппенгеймера.
3. Чем можно пренебречь в приближении Борна-Оппенгеймера.

#### Рекомендуемая литература

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].

#### 5. Тема: Метод валентных связей.

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. На чём основан метод валентных связей.
2. Гибридизация атомных орбиталей.
3. Резонанс канонических структур.

#### Рекомендуемая литература

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].

#### 6. Тема: Метод молекулярных орбиталей.

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. На чём основан метод молекулярных орбиталей.
2. Основные квантовые числа.
3. Причины устойчивости молекул с точки зрения метода молекулярных орбиталей.
4. Преимущества и недостатки метода МО.

#### Рекомендуемая литература

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].

#### 7. Тема: Приближение линейных комбинаций атомных орбиталей. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. МО гомоядерных двухатомных молекул. Электронные конфигурации гомоядерных молекул. МО гетероядерных двухатомных молекул.

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. На чём основано приближение линейных комбинаций атомных орбиталей.
2. Метода МО ЛКАО для атома водорода.
3. Электронные конфигурации гомоядерных и гетероядерных молекул.

#### Рекомендуемая литература

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].

**8. Тема: Полуэмпирические методы расчета.** Основные требования к полуэмпирическим методам.

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. Упрощения, вводимые в полуэмпирических методах.
2. Область применимости полуэмпирических методов.
3. Требования, выдвигаемые к полуэмпирическим методам.

#### Рекомендуемая литература

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].

**9. Тема: Метод молекулярных орбиталей Хюккеля.** Расчет энергий МО: циклобутadiен, бензол, этилен, циклические полиены, молекулы с гетероатомами, полициклоароматические соединения.

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. Для какого класса соединений был разработан метод МО Хюккеля?
2. Суть упрощения ММО Хюккеля.
3. Допущения метода МО Хюккеля.
4. Вычислите энергию МО: циклобутadiена, бензола, этилена.

#### Рекомендуемая литература

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].

**10. Тема: Базисные ряды атомных орбиталей.** Слетеровские функции. Расщепленные валентные орбитали. Эффективные потенциалы остова. Критерии сходимости.

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. Слетеровские функции.
2. Валентно-расщепленные базисные наборы.
3. Однокомпонентные и двухкомпонентные волновые функции.
4. Критерии сходимости.

#### Рекомендуемая литература

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].

**11. Тема: Визуализация пространственной структуры молекул.** Редактирование структурных химических формул в программе ChemDraw. Визуализация молекулярных структур с использованием программы Chem3D.

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. Построение пространственных структур молекул.
2. Построение пространственных структур молекул в программе ChemGraw.
3. Визуализация молекулярных структур в программе Chem3D.

#### Рекомендуемая литература

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].

**12. Тема: Знакомство с базами данных по спектроскопии и термодинамическим характеристикам соединений различных классов.**

Вопросы для самоконтроля знаний:

1. Виды спектроскопии.
2. Термодинамические характеристики соединений различных классов.
3. Спектроскопические и термодинамические базы данных.

**Рекомендуемая литература**

основная: [1].

дополнительная: [2], [3], [4].