

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М. В. Ломоносова
Протокол № 4 от 3 июня 2015 г.

Рабочая программа дисциплины

1. Наименование дисциплины (модуля): **«Математическая и квантовая химия».**

Краткая аннотация: Цель курса «Математическая и квантовая химия» - дать углубленное изложение современного учения о строении молекул и динамике их превращений на основе представлений и методов квантовой механики, квантовой химии, молекулярной физики, математической физики, численных методов, методов молекулярной механики и статистической физики. Этот материал необходим при подготовке к сдаче экзамена кандидатского минимума по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки, **направленность**: Математическая и квантовая химия

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)»

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-1 способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	В1(УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
УК-2 способность проектировать и осуществлять ком-	З1 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности

плексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	В2 (УК-2) Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать, применять и разрабатывать в профессиональной деятельности расчетно-теоретические методы исследования
ПК-15 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.17 Математическая и квантовая химия	34 (ПК-15) Знать современное состояние науки в области математической и квантовой химии
	У3 (ПК-15) Уметь строить математические и квантово-химические модели электронного и пространственного строения молекул и химических веществ и использовать их для описания свойств химических соединений и изучения механизмов их превращений
	У4 (ПК-15) Уметь использовать представления современной теории строения и динамики атомно-молекулярных систем для понимания современной научной литературы
	У5 (ПК-15) Уметь получать расчетные термодинамические и кинетические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 5 зачетных единиц, всего 180 часов, из которых 82 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (72 часа - лекции, 6 часов – групповые консультации, 4 часа – мероприятия промежуточной аттестации), 98 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия

В специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы: «Математический анализ», «Аналитическая геометрия», «Линейная алгебра», «Физика», «Теория вероятности и математическая статистика», «Физическая химия», «Классическая механика», «Квантовая механика», «Квантовая химия», «Строение молекул».

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа, часы из них						Самостоя- тельная ра- бота, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Тема 1. Общий формализм квантовой теории: математический аппарат и особенности описания молекулярных систем	26	12					12	14		14
Тема 2. Переходы между стационарными состояниями в молекулярных системах.	18	8					8	10		10
Тема 3. Простейшие квантово-механические модели молекулярных систем	18	8					8	10		10
Тема 4. Электронные состояния молекул.	28	12					12	16		16
Тема 5. Симметрия в молекулярных задачах.	18	8					8	10		10

Тема 6. Физико-химические явления, связанные со спином.	16	8					8	8		8
Тема 7. Статистические и молекулярно-динамические подходы.	18	8					8	10		10
Тема 8. Принципы моделирования кинетики элементарного акта химических реакций.	18	8					8	10		10
Промежуточная аттестация: <u>зачет</u>	4							10		
Итого	180	72		6			4	82	88	98

Тема 1. Общий формализм квантовой теории: математический аппарат и особенности описания молекулярных систем

Математический формализм квантовой механики. Основные операторы физических величин, коммутационные соотношения между ними. Длина волны де Бройля. Принципы неопределенности. Соотношение неопределенности энергия-время. Представление векторов и операторов матрицами. Унитарные преобразования операторов и векторов. Эрмитовы операторы. Спектр оператора. Дискретный и непрерывный спектр. Особенности описания состояний непрерывного спектра. Координатное и импульсное представления волновые функции. Эволюция состояний. Нестационарное и стационарное уравнения Шредингера. Основные свойства решений уравнения Шредингера. Осцилляционная теорема. Квазиклассическое приближение. Правило квантования Бора-Зоммерфельда. Предельный переход и классический предел для уравнения Шредингера. Уравнение непрерывности. Изменение средних значений во времени и интегралы движения в квантовой механике. Соотношения Эренфеста. Когерентные состояния и волновые пакеты. Чистые и смешанные состояния в квантовой механике. Матрица плотности. Точно (аналитически) решаемые одночастичные задачи квантовой механики. Частица в прямоугольном потенциале. Гармонический осциллятор. Осциллятор Морзе. Жесткий ротатор и операторы углового момента. Одноэлектронный атом (атом водорода, ридберговский атом). Приближенные методы решения задач квантовой химии: вариационный метод, методы теории возмущений.

Тема 2. Переходы между стационарными состояниями в молекулярных системах.

Переходы в молекулах под действием внешних полей и их скорость в первом порядке теории возмущений. Эйнштейновское описание переходов. Основные элементарные процессы, протекающие при взаимодействии электромагнитного излучения с молекулами. Поглощение, самопроизвольное и вынужденное испускание, комбинационное рассеяние. Излучение абсолютно черного тела и формула Планка. Лазерная спектроскопия. Энергетические и временные характеристики внутримолекулярных процессов. Спектр, форма и типы уширения спектральных линий. Эффект Доплера. Лазерный синтез ультрахолодных молекулярных ансамблей. Методы фак-

торизации структурных параметров молекул. Внутримолекулярные взаимодействия и неадиабатические переходы. «Золотое правило» Ферми и формула Ландау-Зинера. Расчет радиационных характеристик. Строение и динамика ридберговских состояний. Аналитическая теория квантового дефекта. Фотоэлектронная спектроскопия. Автоионизационные состояния молекул. Ионизационные методы анализа строения молекул.

Тема 3. Простейшие квантово-механические модели молекулярных систем

Адиабатическое приближение и его применение. Поверхности потенциальной энергии и их особые точки. Матрица Гессе. Молекулярные постоянные, характеризующие энергетический спектр молекулы и их связь со строением потенциальных поверхностей. Построение и анализ многомерных поверхностей потенциальной энергии. Теорема Гельмана — Фейнмана. Расчет молекулярных постоянных. Наиболее распространенные алгоритмы поиска минимумов в задачах различной размерности и факторы, влияющие на их эффективность. Пересечение поверхностей потенциальной энергии. Выход за рамки адиабатического приближения и области квазивыврождения. Адиабатическое и диабатическое представление. Вероятность неадиабатического перехода. Проблема разделения поступательного, вращательного и колебательного движений и проблемы оценки статистических сумм молекул. Колебательно-вращательные движения, условия Эккарта и их применение для отделения колебаний от трансляций и вращений. Вращение молекулы как целого. Состояния и квантовые числа, характеризующие разные типы волчков. Колебания молекул. Гармоническая и ангармонические модели. Нормальные и локальные колебания. Резонансные явления в спектрах. Колебательно-вращательные состояния двух- и многоатомных молекул, соответствующие молекулярные постоянные и расчет статистических сумм по состояниям. Спектральные проявления межмолекулярного взаимодействия. Поле, создаваемое молекулой, и мультипольные моменты. Спектральные проявления межмолекулярного взаимодействия.

Тема 4. Электронные состояния молекул.

Классификация электронных состояний. Квантовохимические методы описания электронных состояний молекул. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри-Фока. Кулоновские и обменные операторы. Оператор Фока. Одно- и двухэлектронные интегралы. Интерпретация решений уравнений Хартри-Фока. Теорема Купманса и первые вертикальные потенциалы ионизации. Теорема Бриллюэна. Энергия и электронная плотность. Симметрия волновых функций и симметрия орбиталей. Использование симметрии в молекулярных задачах. Проблемы, возникающие в приближениях типа самосогласованного поля. Базисные наборы атомных орбиталей, наиболее часто используемые в молекулярных задачах. Типы базисных функций. Классификация базисных наборов. Экстраполяция к полному базисному набору. Суперпозиционная ошибка базиса. Энергия электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия и его основные формы. Проблема размерной несогласованности. Учет электронной корреляции и диссоционный предел. Статическая и динамическая корреляция. Многоконфигурационные методы самосогласованного поля. Метод конфигурационного взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями. Применение теории возмущений для учета энергии электронной кор-

реляции. Теория возмущений Меллера-Плессета. Различные варианты построения многоконфигурационной теории возмущений. Точность методов и качество волновых функций нулевого приближения. Техника эффективных гамильтонианов. Кластерное разложение электронной волновой функции и метод связанных кластеров. Сопоставление методов связанных кластеров, конфигурационного взаимодействия и теории возмущений. Одно- и двухчастичные матрицы плотности. Свойства электронной плотности молекулы. Электронная плотность и геометрия молекул. Спиновая плотность. Теория функционала электронной плотности. Уравнения Кона-Шэма. Основные типы функционалов плотности. Особенности описания возбужденных электронных состояний. Методы линейного отклика. Методы, основанные на анализе функций Грина. Эволюция состояний системы и энергии возбуждения. Методы уравнений движения. Зависящая от времени теория ССП и родственные приближения.

Тема 5. Симметрия в молекулярных задачах.

Точечная и перестановочная симметрия волновых функций. Классификация состояний, символы атомных и молекулярных состояний, кратность вырождения. Симметрия и взаимодействие различных типов движений в молекуле. Симметрия состояний и правила отбора для переходов между ними. Связь атомных и молекулярных термов. Основные представления о симметрии кристаллических систем. Прямая и обратная решетки. Зонная структура спектра кристаллических веществ. Теория кристаллического поля и теории поля лигандов.

Тема 6. Физико-химические явления, связанные со спином.

Связь спина и перестановочной симметрии волновых функций. Принцип Паули. Спин-орбитальное, спин-спиновое и сверхтонкое взаимодействия. Взаимодействие молекулы с электромагнитным полем в присутствии внешних полей. Электрические и магнитные свойства молекулы. Поляризуемость и магнитная восприимчивость. Основные представления о методах ЭПР- и ЯМР-спектроскопии. Применение этих методов для анализа внутримолекулярных взаимодействий.

Тема 7. Статистические и молекулярно-динамические подходы.

Фазовое пространство. Молекулярно-динамический и статистический подходы к описанию термодинамической системы и их взаимосвязь. Ансамбли Гиббса и функции распределения плотности вероятности как характеристика типа ансамбля. Температура и давление в статистической термодинамике и в методах молекулярной динамики. Теорема вириала. Системы с отрицательной термодинамической температурой. Обобщенная теорема о равномерном распределении энергии по степеням свободы. Конфигурационный интеграл и расчет термодинамических потенциалов в статистической термодинамике и молекулярной динамике. Термодинамические величины, средние значения и флуктуации. Теплоемкость как дисперсия внутренней энергии в термически равновесных системах. Теплоемкость простейших систем. Колебания в твердом теле и теплоемкость кристалла. Эффект Мёссбауэра. Вращательные и спиновые состояния гомоядерных молекулярных систем, вращательная сумма по состояниям. Переход к классическим пределам. Число сим-

метрии. Квантовая статистика систем многих частиц. Распределения Ферми-Дирака и Бозэ-Эйнштейна, переход к классическому распределению. Статистическое описание изолированных молекул и молекулярных ионов. Микроканонический ансамбль. Расчет плотности колебательных уровней и энтропии изолированной молекулы. Связь микроканонического и канонического ансамбля. Связь плотности колебательных уровней с временами внутримолекулярной колебательной релаксации.

Тема 8. Принципы моделирования кинетики элементарного акта химических реакций.

Переходное состояние и особенности строения матрицы Гессе. Симметрия переходного состояния и симметрия пути реакции. Простейшие индексы реакционной способности. Принцип сохранения орбитальной симметрии. Корреляционные соотношения в химических исследованиях. Представление о современных экспериментальных методах исследования динамики молекулярных систем. Методы времязрешенной импульсной спектроскопии. Теория столкновений и динамика реакций. Сечения и константы скорости реакции. Сечение поверхности потенциальной энергии и координата реакции. Теория переходного состояния в рамках классической и квантовой механики. Вариационный метод в теории переходного состояния. Туннелирование, надбарьерное отражение и другие квантовые эффекты в теории переходного состояния. Расчет константы скорости для реакций, в которых распределение реагентов по энергии существенно отличается от теплового. Расчет скорости распада изолированных молекул в микроканоническом ансамбле. Переход к основной формуле теории активированного комплекса при наличии теплового распределения реагентов по энергии. Оценка констант скоростей переноса энергии в различных физических процессах.

9. Образовательные технологии:

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика, т. 3. М.: Наука, 1989.
2. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, Изд-во МГУ. 2001.
3. Степанов Н. Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия. М.: Изд-во МГУ, 1991.

4. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. (2 изд.) Ростов-на-Дону.: Феникс. 1997.
5. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М.: Изд-во МГУ. Ч.1,2. 1987, 1989.
6. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир. 1985.
7. Драго Р. Физические методы в химии. М.: Мир, 1981, в 2х томах.
8. Эткинс П. Кванты. Справочник концепций. М. Мир. 1977.
9. Szabo A., Ostlund N.S. Modern quantum chemistry. Dover publications, Inc., Mineola, New York, 1996.
10. Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. (2 изд.) М.: Высшая школа, 1982.
11. Эйринг Г., Лин С. Г., Лин С.М. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1983.
12. Уманский С. Я. Теория элементарных химических реакций. М.: Интеллект, 2009.

Дополнительная литература

13. Мессиа А. Квантовая механика, т. 1. М.: Наука, 1978.
14. Бейдер Р. Атомы в молекулах. М.: Мир. 2001
15. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия. 1986.
16. Базаров И. П. Термодинамика. М.: Высшая школа, 1991.
17. Кубо Р. Статистическая механика. М.: Мир, 1967.
18. Ландсберг П. Задачи по термодинамике и статистической физике. М.: Мир, 1974.
19. Atkins P., Friedman R. Molecular quantum mechanics, 4th Ed., Oxford University Press, 2005.
20. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulations of liquids. Oxford University Press, 1989.
21. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry, 2nd Ed., John Wiley and Sons, Ltd., 2007.
22. Фейнман Р. Статистическая механика. (2 изд.) М.: Мир, 1978.

- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы:
 - Национальный институт стандартов и технологий (NIST), банк термодинамических данных: www.nist.gov
 - Объединенный институт высоких температур РАН, термодинамические свойства индивидуальных соединений: <http://jiht.ru/>

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

Боченкова Анастасия Владимировна, к.ф.-м.н., доцент; bochenkova@phys.chem.msu.ru

Пупышев Владимир Иванович, к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник; vipupyshev@mail.ru
Столяров Андрей Владиславович, д.ф.-м.н., зав. кафедрой лазерной химии; avstol@gmail.com
Зайцевский Андрей Вениаминович, д.ф.-м.н., главный научный сотрудник; andrei.zaitsevskii@gmail.com
Немухин Александр Владимирович, д.х.н., профессор; anem@lcc.chem.msu.ru
Иоффе Илья Нафтольевич, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник; ioffe@thermo.chem.msu.ru
Лайков Дмитрий Николаевич, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник; laikov@rad.chem.msu.ru
Краснощеков Сергей Вадимович, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник; sergeyk@phys.chem.msu.ru
Фельдман Владимир Исаевич, д.х.н., профессор; feldman@rc.chem.msu.ru

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.
2. Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета.

• Образцы контрольных вопросов для текущего контроля усвоения материала:

1. Получить соотношения Эренфеста для координаты и импульса.
2. Записать операторы координаты и импульса в импульсном представлении
3. Построить какой-нибудь пример набора d-функций (f-функций).
4. Описать изменения колебательного спектра заданного набора молекул при изотопном замещении. Описать изменение туннельного расщепления в системах. Примеры систем: H_2O , HDO , D_2O ; NH_3 , NH_2D , NHD_2 , ND_3 .
5. В чем состоят и по каким причинам могут нарушаться правила Каши, Вавилова, Левшина?
6. Для заданной двухатомной молекулы с помощью стандартных справочных данных определить колебательно-вращательный уровень, наиболее заселенный при комнатной температуре.
7. Описать систему энергетических уровней и соответствующие значения квантовых чисел для двух эквивалентных частиц со спином $\frac{1}{2}$ во внешнем магнитном поле.
8. Какие квантовые числа описывают вращательные состояния молекул типа сферического волчка? Какое состояние наиболее заселено при заданной температуре? Почему это состояние не совпадает с тем, которое наиболее заселено для двухатомной молекулы ("задача о свободном ротаторе") с тем же самым значением вращательной постоянной?

9. Объясните, почему газообразные азот и кислород бесцветны, а интенсивность окраски газообразных галогенов меняется с ростом номера элемента.
10. Описать зависимость энергии взаимодействия двух диполей (заряда и диполя, двух квадрупольей, ...) в зависимости от их взаимной ориентации.
11. Почему в случае систем в электрическом поле нет аналогов диа- и пара-магнетиков?
12. Рассмотреть задачу о свободном движении частицы по окружности. Как соотнести строение энергетического спектра этой задачи с явлением ароматичности?
13. Почему при одной и той же электронной конфигурации триплетное состояние по энергии лежит ниже синглетного?
14. Можно ли с помощью одного детерминанта Слэтера описать разрыв химической связи и выход на нижний диссоционный предел в молекуле H_2 ?
15. Постройте все синглетные и триплетные многоэлектронные волновые функции для молекулы H_2 в минимальном базисе, используя детерминантное представление волновых функций. Симметричны или антисимметричны синглетные (триплетные) спиновые функции относительно перестановки индексов двух электронов?
16. Определите точечную группу симметрии для следующих молекул: H_2O , CO_2 , C_2H_4 , цис- $ClHC-CHCl$, транс- $ClCH-CHCl$, бензол, нафталин, $CHClFBr$, $B(OH)_3$. Какие из перечисленных выше молекул обладают постоянным электрическим дипольным моментом? Почему?
17. Почему в кристаллах симметрия элементарной ячейки не может в себя включать поворотную ось пятого порядка?
18. По каким неприводимым представлениям преобразуются четыре $1s$ орбитали атомов водорода в молекуле метана? Что можно сказать о кратности вырождения молекулярных орбиталей метана?
19. Какие электронные переходы разрешены в молекуле, содержащей карбонильный фрагмент?
20. Проиллюстрируйте образование зон в твердом теле с помощью метода Хюккеля.
21. Для каких молекул действует правило альтернативного запрета в колебательной ИК и КР спектроскопии?
22. По каким неприводимым представлениям преобразуются нормальные моды любой нелинейной трехатомной молекулы AB_2 в группе C_{2v} ? Какие колебания активны в ИК, а какие в КР?
23. Молекула азулена обладает большим дипольным моментом. Объясните почему. Как направлен дипольный момент в молекуле?
24. Описать поведение теплоемкости в зависимости от температуры для ряда модельных систем (гармонический осциллятор, N-уровневый гармонический осциллятор, осциллятор Морзе, заторможенное внутреннее вращение).
25. Оценить время жизни изолированной молекулы после поглощения нескольких (один, два, три) фотонов в видимом диапазоне.
26. Как оценить константу скорости для реакции рекомбинации двух атомов?

27. Оценить вероятность неадиабатического перехода в двухатомной молекуле (NaI).

• **Вопросы для промежуточной аттестации – зачета:**

1. Представление векторов и операторов матрицами. Унитарные преобразования операторов и векторов. Эрмитовы операторы. Спектр оператора. Дискретный и непрерывный спектр. Особенности описания состояний непрерывного спектра. Координатное и импульсное представления волновых функций.
2. Эволюция состояний. Нестационарное и стационарное уравнения Шредингера. Основные свойства решений уравнения Шредингера. Квазиклассическое приближение. Предельный переход и классический предел для уравнения Шредингера. Уравнение непрерывности.
3. Изменение средних значений во времени и интегралы движения в квантовой механике. Соотношения Эренфеста.
4. Основные операторы физических величин, коммутационные соотношения между ними. Принципы неопределенности. Когерентные состояния и волновые пакеты.
5. Основные элементарные процессы, протекающие при взаимодействии электромагнитного излучения с молекулами. Поглощение, самопроизвольное и вынужденное испускание, рассеяние и комбинационное рассеяние излучения.
6. Электрические и магнитные свойства молекулы. Поляризуемость и магнитная восприимчивость. Мультипольные моменты. Поле, создаваемое молекулой. Взаимодействие молекул.
7. Связь спина и перестановочной симметрии волновых функций. Принцип Паули. Спин-орбитальное и спин-спиновое взаимодействия.
8. Классические точно решаемые одночастичные задачи квантовой механики. Частица в прямоугольном потенциале. Гармонический осциллятор. Жесткий ротатор и операторы углового момента. Одноэлектронный атом. Расчет статических сумм.
9. Квантовая статистика систем многих частиц. Электронный газ. Фотонный газ.
10. Принципы современных методов спектральных исследований молекулярных систем.
11. Адиабатическое приближение. Поверхности потенциальной энергии и их особые точки. Молекулярные постоянные, характеризующие строение потенциальных поверхностей. Особенности строения переходных состояний.
12. Энергетический спектр двухатомной молекулы и соответствующие молекулярные состояния. Электронно-колебательно-вращательные состояния двухатомных молекул, соответствующие молекулярные постоянные и расчет статистических сумм по состояниям.
13. Классификация электронных состояний молекулы. Фото- и рентгено-электронная спектроскопия. Автоионизационные состояния атомов и молекул. Ионизационные методы анализа, применяемые в физической химии.
14. Вариационный метод и его приложения: приближение Хартри-Фока, метод конфигурационного взаимодействия. Теорема Купманса и первые потенциалы ионизации. Простейшие модели молекулярных орбиталей и описание химической связи. Ограниченность орбитальной модели. Методы учета электронной корреляции.
15. Простейшие модели электронного строения молекул. Химическая связь и электронные распределения. Свойства электронной плотности молекулы. Электронная плотность и геометрия молекул. Спиновая плотность.

16. Колебательные состояния молекул. Гармоническая и ангармонические модели сил в молекуле. Нормальные и локальные колебания. Резонансные явления в спектрах.
17. Взаимодействие молекулы с электромагнитным полем в присутствии внешних полей. Основные представления о методах ЭПР- и ЯМР-спектроскопии. Применение этих методов для анализа внутримолекулярных взаимодействий.
18. Симметрия в молекулярных задачах. Точечная и перестановочная симметрия волновых функций. Основные типы симметрии и классификация состояний. Симметрия и взаимодействие различных типов движений в молекуле.
19. Кристаллические системы. Основные представления теории кристаллов. Симметрия кристаллов. Зонная структура спектра кристаллических веществ.
20. Принципы квантовохимического описания кинетики элементарного акта химической реакции. Симметрия переходного состояния. Простейшие индексы реакционной способности. Принцип сохранения орбитальной симметрии.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проходит в форме устного ответа на вопросы, включенные в перечень заданий и вопросов для промежуточной аттестации. На каждого аспиранта заполняется ведомость, которая подписывается преподавателем, принимающим зачет.

**Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Математическая и квантовая химия»
на основе карт компетенций выпускников**

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
В1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Отсутствие владения	Неполное владение отдельными приемами квантово-химического анализа	Владение шаблонными приемами квантово-химического анализа, достаточное только в рутинных случаях	Довольно полное, но содержащее отдельные пробелы владение приемами квантово-химического анализа	Сформированное систематическое владение приемами квантово-химического анализа	Устный опрос в ходе зачета
31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о методах анализа строения молекул и веществ	Несистематические знания о методах анализа строения молекул и веществ	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о методах анализа строения молекул и веществ	Сформированные и систематические знания о методах анализа строения молекул и свойств веществ	Устный опрос в ходе зачета
В2 (УК-2) Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований	Отсутствие владения	Владение планированием только отдельных этапов структурного исследования	Владение построением шаблонных планов структурного исследования	Довольно успешное, но недостаточно гибкое владение приемами планирования структурного исследования	Полное владение технологиями гибкого планирования структурного исследования	Устный опрос в ходе зачета
У1(ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Умение выбирать методы анализа строения только на отдельных этапах исследования	Шаблонное умение обоснованно выбирать методы анализа строения на всех этапах исследования	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение обоснованно выбирать методы анализа строения на всех этапах исследования	Сформированное умение гибко использовать возможности современных методов анализа строения на всех этапах исследования	Устный опрос в ходе зачета
34 (ПК-15) Знать современное состояние науки в	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о роли квантовой тео-	Ограниченные представления о роли квантовой	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о роли и воз-	Сформированные и систематические знания о роли квантовой теории в химии	Устный опрос в ходе зачета

области математической и квантовой химии		рии в химии	теории в химии	можностях квантовой теории в химии		
У3 (ПК-15) Уметь строить математические и квантово-химические модели электронного и пространственного строения молекул и химических веществ и использовать их для описания свойств химических соединений и изучения механизмов их превращений	Отсутствие знаний	Фрагментарное умение моделировать и рассчитывать свойства молекул и веществ	Шаблонное умение моделировать и рассчитывать свойства молекул и веществ	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение моделировать и рассчитывать свойства молекул и веществ	Сформированное умение гибко моделировать и рассчитывать свойства молекул и веществ	Устный опрос в ходе зачета
У4 (ПК-15) Уметь использовать законы квантовой химии и теории строения молекул для моделирования практических задач, в том числе, при разработке новых материалов и технологий	Отсутствие знаний	Фрагментарное умение использовать законы квантовой химии и теории строения молекул для решения практических задач	Шаблонное умение использовать законы квантовой химии и теории строения молекул для решения практических задач	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать законы квантовой химии и теории строения молекул для решения практических задач	Сформированное умение использовать законы квантовой химии и теории строения молекул для решения практических задач	Устный опрос в ходе зачета
У5 (ПК-15) Уметь получать расчетные термодинамические и кинетические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарное умение получать расчетные термодинамические и кинетические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности	Шаблонное умение получать расчетные термодинамические и кинетические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение получать расчетные термодинамические и кинетические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности	Сформированное умение получать расчетные термодинамические и кинетические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности	Устный опрос в ходе зачета