

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»  
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет  
Кафедра химической и биологической физики**



ТВЕРЖДАЮ  
Декан ФФ, д.ф.-м.н  
В.Е.Блинов  
2022 г.

**Рабочая программа дисциплины**

**КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА МОЛЕКУЛ**

направление подготовки: **03.03.02 Физика**  
направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения  
**Очная**

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)					
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем				
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	
8	108	32	32		22	18	2				2
Всего 108 часов /3 зачетные единицы из них: - контактная работа 68 часов											
Компетенции ПК-1											

Ответственный за образовательную программу,  
д.ф.-м.н., проф.

С.В. Цыбуля

Новосибирск, 2022

## Содержание

Аннотация.....**Ошибка! Закладка не определена.**

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы. ....	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы. ....	3
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу. ....	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий. ....	5
5. Перечень учебной литературы. ....	8
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся. ....	9
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	9
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине. ....	10
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	10
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине. ....	10

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

Цель учебного курса «Квантовая механика молекул» – получение слушателями практических навыков описания строения молекулярных систем на языке квантовой механики с использованием симметрии задачи.

Материал курса увязывается с передовыми исследованиями, обсуждаемые качественные и аналитические подходы для модельных систем проектируются на современные точные расчетные и экспериментальные результаты для реальных молекул. Отмечаются темы, активно обсуждаемые в текущей профессиональной научной литературе. Все занятия проводятся в интерактивной форме. В течение семестра каждый из студентов работает у доски на семинарах (продолжительность одного занятия позволяет за занятие побывать у доски практически каждому) и решает задачи из комплектов для самостоятельной работы. При этом решению задачи предшествует коллективное обсуждение условий задачи и возможных путей решения. Важным элементом работы на семинаре является индивидуальное общение преподавателя со студентами, при котором у преподавателя есть возможность увидеть пробелы в понимании темы данным студентом и помочь ему в преодолении трудностей. При наличии активно взаимодействующих групп студентов приветствуется решение задачи в группе. При возникновении трудностей у большей части студентов, задача разбирается у доски с одним из решивших ее студентов.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующей профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<b>ПК-1</b> Способность использовать специализированные знания в области физики при построении теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	<p><b>ПК 1.1</b> Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.</p> <p><b>ПК 1.2</b> Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области.</p> <p><b>ПК 1.3</b> Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования</p>	<p><b>Знать</b> основные принципы и закономерности, определяющие электронную структуру атомов и молекул.</p> <p><b>Уметь</b> рассчитывать молекулярные орбитали, определять термы атомов и молекул, определять разрешенные переходы в различных видах спектроскопии.</p> <p><b>Владеть</b> представлениями о спектрах ЭПР и ЯМР различных радикалов и молекул; об использовании теории групп при решении различных задач по спектроскопии и при определении реакционной способности молекул.</p>

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Квантовая механика молекул» реализуется для обучающихся по направлению подготовки 03.03.02 Физика. Общая и фундаментальная физика. Курс относится к циклу специальных дисциплин и занимает особое место в цикле физико-химических дисциплин. Приступающие к освоению курса студенты-физики уже имеют за плечами годовые общие курсы

квантовой механики и методов математической физики с элементами теории групп, семестровые курсы атомной физики, спектроскопии магнитного резонанса и органической химии, в магистратуре же им предстоит освоить курсы основы теории элементарных химических реакций и квантовой химии. Таким образом, студенты к началу курса имеют за плечами значительную теоретическую подготовку, а на старших курсах им предложат дисциплины, охватывающие самые современные приложения квантовой механики в задачах химической физики. Однако при этом оказывается, что при такой солидной базе студенты часто оказываются неспособными решать практические задачи – слишком велик получается разрыв между чистыми и точно решаемыми задачами общего курса квантовой механики и абстрактной теории групп и современными методами вычислительной квантовой химии, с одной стороны, и требующими большого количества неочевидных приближений, часто очень громоздких при лобовом решении реальными задачами. Нередко студенты оказываются в тупике, столкнувшись с физической, не говоря о химической постановке задачи. Данный курс призван заполнить указанный пробел и дать студентам навыки решения практически важных задач.

### 3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
8	108	32	32		22	18	2			2
Всего 108 часов /3 зачетные единицы										
из них:										
- контактная работа 68 часов										
Компетенции ПК-1										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, практические занятия, самостоятельная работа студентов, консультации, экзамен.

Текущий контроль: решение задач из задания для самостоятельного решения

Промежуточная аттестация: экзамен

Общая трудоёмкость рабочей программы дисциплины составляет **108** академических часа / **3** зачетные единицы:

- занятия лекционного типа – 32 часа;
- практические занятия – 32 часа;
- самостоятельная работа, не включая период сессии -22 часа;
- самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации (подготовка к экзамену, консультации, экзамен) – 22 часа.

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (лекции, практические занятия, консультации, экзамен) составляет 68 часов.

**4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.**

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зачётные единицы, 108 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоёмкость (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	
				Лекции	Практические занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8
1.	Атом. Геометрические свойства и их наглядное представление.	1	4	2	2		
2	Электронное строение изолированного многоэлектронного атома. Классификация термов.	2	6	2	2	2	
3	Классификация термов изолированного многоэлектронного атома.	3	4	2	2		
4.	Построение электронных волновых функций многоэлектронного атома.	4	6	2	2	2	
5.	Поведение волновой функции при пространственных преобразованиях. Правила Вигнера-Витмера для двухатомных гетеро-ядерных молекул.	5	4	2	2		
6.	Перестановочная симметрия электронной волновой функции двухатомной молекулы. Правила Вигнера-Витмера для двухатомных гомоядерных молекул.	6	6	2	2	2	
7.	Описание образования связей в молекулах. Метод молекулярных орбиталей. Применение метода МО ЛКАО для описания строения двухатомных молекул.	7	6	2	2	2	
8.	Применение метода МО ЛКАО для описания строения простых многоатомных молекул.	8	6	2	2	2	
9.	Метод Хюккеля для ароматических $\pi$ -систем. Графический подход.	9	6	2	2	2	
10.	Метод Хюккеля для ароматических $\pi$ -систем.	10	6	2	2	2	

	Системы специального вида.						
11.	Реакционная способность молекул. Метод возмущенных орбиталей.	11	6	2	2	2	
12.	Использование аппарата теории групп в методе МО ЛКАО. Точные группы симметрии и точечные группы молекул.	12	6	2	2	2	
13.	Генеалогия и структура точечных групп. Группы симметрии реальных систем. Таблица характеров неприводимых представлений группы.	13	4	2	2		
14.	Построение представления на базисе и разложение его на неприводимые. Приведение базиса по симметрии и снижение размерности задачи. Правила отбора и таблица разрешенных переходов.	14	6	2	2	2	
15	Теория кристаллического поля. Точечные группы высшей симметрии. Редукция групп.	15-16	10	4	4	2	
	Групповая консультация		2				2
	Самостоятельная подготовка обучающегося к экзамену		18				18
	Экзамен		2				2
			<b>108</b>	<b>32</b>	<b>32</b>	<b>22</b>	<b>22</b>

### Программа и основное содержание лекций (32 часа)

#### 1. Атомы водорода и гелия – модельные системы для описания одно- и многоэлектронных атомов (2 часа)

Уравнение Шредингера для атома водорода и его решение. Волновые радиальные и угловые функции. Квантовые числа. Водородоподобные одноэлектронные атомы. Принцип Паули и определитель Слейтера. Атом гелия – модельная система для многоэлектронных атомов. Учет межэлектронного взаимодействия по теории возмущений и с помощью вариационного принципа

#### 2. Подходы к описанию многоэлектронных систем. Химические свойства атомов (2 часа)

Слейтеровские радиальные функции, оценка размеров многоэлектронных атомов. Одноэлектронное приближение, самосогласованное поле, методы Хартри и Хартри – Фока. Заполнение электронных орбиталей, электронные конфигурации и периодическая таблица Менделеева. Химические свойства атомов. Потенциал ионизации и сродство к электрону.

#### 3. Спин-орбитальное взаимодействие (2 часа)

Иерархия взаимодействий в атоме, спин-орбитальное взаимодействие. Термы атомов, схемы Рассел – Саундерса и  $j-j$  – связи. Правила Гунда, образование прямых и обращенных мультиплетов. Волновые функции и энергии атомных термов. Правила отбора для дипольных переходов в атомной спектроскопии.

#### 4. Двухатомные молекулы (2 часа)

Систематика термов двухатомных молекул. Молекулярные термы, возникающие при сближении двух атомов. Правила Вигнера-Витмера для гомоядерных молекул. Учет спин-орбитального

взаимодействия по Гунду. Правила отбора для дипольных переходов в спектроскопии двухатомных молекул. Приближение Борна – Оппенгеймера. Метод Гайтлера – Лондона (метод валентных схем), причина возникновения химической связи.

### **5. Метод молекулярных орбиталей (МО) (2 часа)**

Основные приближения метода МО. Построение волновой функции многоатомной молекулы как линейной комбинации атомных орбиталей (МО ЛКАО). Кулоновский и резонансный интегралы в методе МО. Нахождение основного терма двухатомных молекул на примере молекулы кислорода. Корреляционные диаграммы Уолша. Метод МО в приближении Хюккеля (МОХ).

### **6. Элементы теории групп. Теория представлений (2 часа)**

Определение и свойства группы. Операции симметрии, характерные для точечных групп. Основные положения теории представлений – понятия базиса, матрицы и характера представлений. Свойства характеров неприводимых представлений (НП). Разложение приводимых представлений (ПП) по базису НП, прямое произведение представлений.

### **7. Применение теории представлений для описания молекулярных систем (2 часа)**

Систематика термов молекул в рамках теории представлений. Применение теории групп для нахождения МО, электронных конфигураций и термов молекул (вода, аммиак, бензол, бутadiен). Правила отбора для оптических дипольных переходов в сложных молекулах.

### **8. Применение метода МОХ к определению строения и свойств молекулярных $\pi$ - систем (2 часа)**

Общие свойства детерминантов Хюккеля в методе МОХ. Индексы реакционной способности –  $\pi$ -заряд, спиновая плотность, порядок связи, индекс свободной валентности. Альтернантные углеводороды, расположение уровней энергии, симметрия молекулярных орбиталей, распределение спиновой плотности в нечетных альтернантных углеводородах. Циклические  $\pi$ -системы, энергии и вид МО. Определение энергии и вида МО линейных  $\pi$ -систем посредством достроения линейной системы до соответствующей циклической. Учет гетероатомов в методе МОХ.

### **9. Теория заместителей (2 часа)**

Понятие об индуктивных и мезомерных заместителях. Учет влияния индуктивных заместителей в рамках теории возмущений. Поляризуемость атом – атом. Альтернирование заряда в ароматических молекулах с заместителями. Влияние индуктивных заместителей на вырожденные уровни энергии в  $\pi$ -системах. Учет мезомерных заместителей во втором порядке теории возмущений.

### **10. Применение теории возмущений для $\pi$ -систем (2 часа)**

Определение устойчивости молекулярных и радикальных  $\pi$ -систем, реакционной способности радикалов и изменения  $\pi$ -электронной энергии при объединении  $\pi$ -систем.

### **11. Влияние заместителей на реакционную способность $\pi$ -систем (2 часа)**

Ориентация в реакциях нуклеофильного, радикального и электрофильного замещения в  $\pi$ -системах с различными типами заместителей. Индексы локализации.

### **12. Правила симметрии в синхронных реакциях (2 часа)**

Использование представлений симметрии при рассмотрении реакционной способности. Правила Вудворда – Гоффмана для синхронных реакций. Электроциклические реакции, реакции замыкания и размыкания цикла, сигматропные реакции. Конротаторное и дисротаторное, супраповерхностное и антароповерхностное сближение. Термически и фотохимически разрешенные синхронные реакции.

### **13. Генеалогия и структура точечных групп (2 часа).**

Группы симметрии реальных систем. Таблица характеров неприводимых представлений группы.

#### 14. Построение представления на базисе и разложение его на неприводимые (2 часа).

Приведение базиса по симметрии и снижение размерности задачи. Правила отбора и таблица разрешенных переходов.

#### 15. Теория кристаллического поля (4 часа).

Точечные группы высшей симметрии. Редукция групп.

### Программа практических занятий (32 часа)

1. Атомы водорода и гелия – модельные системы для описания одно- и многоэлектронных атомов (2 часа)
2. Подходы к описанию многоэлектронных систем. Химические свойства атомов (2 часа)
3. Спин-орбитальное взаимодействие (2 часа)
4. Двухатомные молекулы (2 часа)
5. Метод молекулярных орбиталей (МО) (2 часа)
6. Элементы теории групп. Теория представлений (2 часа)
7. Применение теории представлений для описания молекулярных систем (2 часа)
8. Применение метода МОХ к определению строения и свойств молекулярных  $\pi$ - систем (2 часа)
9. Теория заместителей (2 часа)
10. Применение теории возмущений для  $\pi$ -систем (2 часа)
11. Влияние заместителей на реакционную способность  $\pi$ -систем (2 часа)
12. Правила симметрии в синхронных реакциях (2 часа)
13. Генеалогия и структура точечных групп (2 часа).
14. Построение представления на базисе и разложение его на неприводимые (2 часа).
15. Теория кристаллического поля (4 часа).

### Самостоятельная работа студентов (40 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	22 часа
Подготовка к экзамену	18 часов

#### 5. Перечень учебной литературы.

##### 5.1. Основная литература

1. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
2. Плюснин В. Ф., Бажин Н. М. Двухатомные молекулы / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1991.
3. Вудворд Р., Гоффман Р. Сохранение орбитальной симметрии. М.: Мир, 1971.



## 5.2. Дополнительная литература

1. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
2. Д.В. Стась, В.Ф. Плюсин, Квантовая механика молекул. Часть 1. Атом / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2008.
3. Д.В. Стась, В.Ф. Плюсин, Квантовая механика молекул. Часть 2. Простые молекулярные системы / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2008.
4. В.Ф. Плюсин, Н.М. Бажин, Н.И. Сорокин, Краткий курс строения вещества / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2007.
5. Бажин Н. М., Салихов К. М. Атом / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1986.
6. Хигаси К., Баба Х., Рембаум А. Квантовая органическая химия. М.: Мир, 1967.
7. Лер Р., Марчланд А. Орбитальная симметрия в вопросах и ответах. М.: Мир, 1976.
8. Робертс Дж. Расчеты по методу молекулярных орбит. М.: Мир, 1963.

## 6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
2. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
3. Д.В. Стась, В.Ф. Плюсин, Квантовая механика молекул. Часть 1. Атом / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2008.
4. Д.В. Стась, В.Ф. Плюсин, Квантовая механика молекул. Часть 2. Простые молекулярные системы / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2008.
5. В.Ф. Плюсин, Н.М. Бажин, Н.И. Сорокин, Краткий курс строения вещества / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2007.
6. Плюсин В. Ф., Бажин Н. М. Двухатомные молекулы / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1991.
7. Вудворд Р., Гоффман Р. Сохранение орбитальной симметрии. М.: Мир, 1971.

## 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

Интернет-ресурсы:

- <http://www.hf.nsu.ru/study.html>

## 7.1 Современные профессиональные базы данных

Не используются.

## **7.2. Информационные справочные системы**

Не используются.

## **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.**

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется.

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

Для реализации дисциплины Квантовая механика молекул используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации;

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

## **10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.**

### **10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине**

#### ***Текущий контроль***

Текущий контроль осуществляется по оценочной системе в виде: заданий для самостоятельного решения и контрольных работ. Оценка знаний, умений, навыков и освоения компетенций обучающимися в рамках текущего контроля может проводиться согласно шкале и критериям, представленным ниже.

В семестре предусмотрена сдача двух домашних заданий, которые сдаются в форме беседы с преподавателем в специально отведенное время (прием заданий). В ходе семестра проводятся две контрольные на 250 баллов, по 5 задач в каждой контрольной.

### **Промежуточная аттестация**

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области квантовой механики молекул в профессиональной деятельности.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена с учётом результатов текущего контроля успеваемости. Студенты, набравшие в сумме за две контрольные больше 350 баллов, получают "5" («отлично» - продвинутый уровень усвоения компетенций), больше 270 баллов – "4" балла («хорошо» - базовый уровень усвоения компетенций, больше 190 – "3" балла («удовлетворительно» - пороговый уровень усвоения компетенций). Студенты, желающие повысить оценку, решают дополнительно четыре задачи в сумме на 200 баллов. Студенты, набравшие в сумме за контрольные и задачи на экзамене больше 450 баллов, получают «отлично», больше 350 – «хорошо», больше 250 – «удовлетворительно».

Оценка «неудовлетворительно» - уровень усвоения компетенций не сформирован.

Обучающийся, имеющий неудовлетворительные результаты при прохождении промежуточной аттестации, обязан ликвидировать академическую задолженность по дисциплине, согласно установленным факультетом срокам прохождения повторной промежуточной аттестации. Сроки проведения повторной промежуточной аттестации согласовываются с преподавателем и утверждаются распоряжением декана.

### **Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины**

**Таблица 10.1**

<b>Индикатор</b>	<b>Результат обучения по дисциплине</b>	<b>Оценочные средства</b>
<b>ПК 1.1</b> Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.	<b>Знать</b> основные принципы и закономерности, определяющие электронную структуру атомов и молекул.	Проведение контрольных работ, экзамен.
<b>ПК 1.2</b> Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области	<b>Уметь</b> рассчитывать молекулярные орбитали, определять термы атомов и молекул, определять разрешенные переходы в различных видах спектроскопии.	Проведение контрольных работ, экзамен.

<p><b>ПК 1.3</b> Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования</p>	<p><b>Владеть</b> представлениями о спектрах ЭПР и ЯМР различных радикалов и молекул; об использовании теории групп при решении различных задач по спектроскопии и при определении реакционной способности молекул.</p>	<p>Проведение контрольных работ, экзамен.</p>
--	---	---

## 10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Квантовая механика молекул».

**Таблица 10.2**

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Демонстрирует общие знания базовых понятий по темам/разделам дисциплины. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 1.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	ПК 1.3	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

## 10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

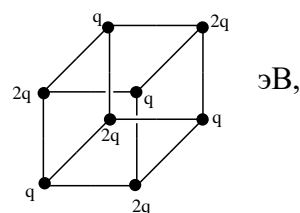
### Примеры контрольных вопросов.

1. Определить терм конфигурации  $p^2$ , к которому относится функция:  $\Psi = 1/2[(1^+0^-)-(1^+0^+)+(0^+1^-)-(0^+1^+)]$ . Ответ обосновать. (30 баллов)

2. Насколько линий, и с каким расстоянием между ними расщепится переход  $nd^2$  (из основного терма конфигурации)  $\rightarrow nd^1(n+1)p^1$  при учете спин-орбитального взаимодействия в рамках  $j-j$  связи? Считать  $\xi_p = \xi_d = \xi$ . (60 баллов)

3. Определить электронное строение (тип и энергии МО, основной терм) и разрешенные электронные переходы (указать число линий и энергию) для линейного радикала  $NH_2$ . Считать  $\alpha(1S_N) = \alpha(2p_N) = \alpha$ ,  $\alpha(2S_N) = \alpha + 2\beta$ ;  $\beta_{s-s} = 2\beta_{p-s} = 2\beta$ . (60 баллов)

4. Качественно изобразить электронное строение, определить электронную конфигурацию и основной терм для катиона  $H_3O^+$  (группа симметрии  $D_{3h}$ ). Для определенности можно считать  $\alpha(1S_H) = -13.6$  эВ,  $\alpha(2p_O) = -17$  эВ,  $\alpha(2S_O) = -35$  эВ. (60 баллов)



5. Качественно изобразить расщепление конфигурации  $d^1$  в поле куба, приведенного на рисунке. Все расстояния до лигандов одинаковы и равны  $a$  (40 баллов)

### Примеры некоторых типовых заданий для самостоятельного решения для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся.

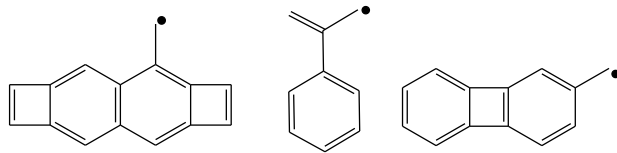
1. Определить группу  $D_{nd}$ , в которой число двумерных неприводимых представлений в 10 раз больше одномерных НП.
2. Построить матрицы операций симметрии в группе  $C_{3v}$  для базиса  $p$ -орбиталей атома азота в молекуле аммиака.
3. Построить таблицу характеров для группы  $C_{4v}$ .

### Перечень примерных задач к экзамену по дисциплине «Квантовая механика молекул».

1. Найти основной терм линейного анион-радикала озона  $O_3^-$ . Учитывать только  $p$ -орбитали атомов кислорода. Считать резонансные интегралы  $\beta_\sigma > \beta_\pi$
2. Найти термы конфигурации  $p^2 f^1$ , определить их четность, вырождение и основной терм. Используя правила Гунда найти основной терм  $d^3$  и  $f^4$  конфигураций.
3. Определить основной терм молекулярного иона  $Fe^{3+}-Cu^{3+}$ . Учитывать только  $d$ -орбитали атомов. Считать резонансные интегралы  $\beta_\sigma > \beta_\pi > \beta_\delta$ .
4. Качественно изобразить расщепление конфигураций  $p^1$  и  $d^1$  в поле октаэдра, по оси  $Z$  которого расположены заряды  $2q$ , остальные заряды по  $q$ . Все расстояния до лигандов одинаковы и равны  $a$
5. Качественно изобразить расщепление конфигураций  $p^1$  и  $d^1$  в поле квадрата ( $D_{4h}$ ). Все расстояния до лигандов одинаковы и равны  $a$ , все заряды лигандов равны  $q$ .
6. Нарисовать корреляционную диаграмму для реакции распада формальдегида на  $H_2$  и  $CO$ .
7. Определить термы конфигурации  $t_{2g}^5 e_g^2$  для октаэдрического комплекса. Указать основной терм.
8. Определить термы конфигурации  $e^3 t_2^2$  для тетраэдрического комплекса. Указать основной терм.

9. Оценить изменение энергии нижней орбитали линейной системы из N атомов водорода при ее замыкании в циклическую систему

10. Найти распределение спиновой плотности для радикалов, изображенных на рисунке.



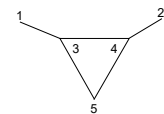
11. Определить волновую функцию с  $M_J = 1$  мультиплета  $^3P_1$ , возникшего из основного термина конфигурации  $p^2$ .

12. Определить направление преимущественного электрофильного замещения в молекуле замещенного циклобутана ( $CH_3C_4H_7$ ).

13. Под действием LS-взаимодействия терм расщепился на 5 мультиплетов с интервалами по энергии 125, 100, 75 и 50  $cm^{-1}$  начиная с нижнего. Определить L и S.

14. Определить, на сколько линий и с каким расстоянием между ними расщепится переход  $np^2 \Rightarrow np^1nd^1$  в случае LS связи. Считать, что заселен только основной терм начальной конфигурации.

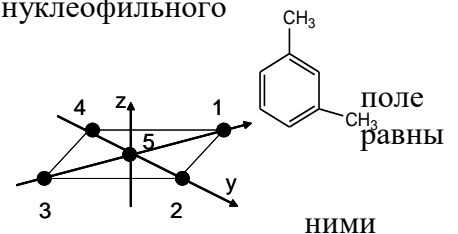
15. Определить электронную конфигурацию и основной терм молекулы Li-C-Li. Учитывать только 2n электроны. Считать все резонансные интегралы одинаковыми.



16. Определите распределение спиновой плотности в  $\pi$ -системе из 5  $\pi$ -центров.

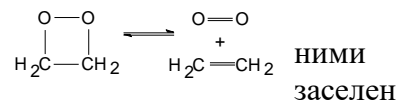
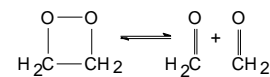
17. Определить предпочтительное направление электрофильного и нуклеофильного замещения в молекуле мета-ксилола

18. Качественно изобразить расщепление конфигураций  $p^1$  и  $d^1$  в симметрии  $C_{3v}$ . Все расстояния до лигандов одинаковы и a, все заряды лигандов равны q.



19. Определить, на сколько линий и с каким расстоянием между ними расщепится переход  $ns^1np^1 \Rightarrow np^2$  в случае j-j связи. Рассмотреть случаи, когда заселен только основной терм начальной конфигурации и когда заселены все термы.

20. Какая из термических реакций распада молекулы диоксетана разрешена по симметрии? На две молекулы формальдегида или на кислород и этилен? Привести корреляционные диаграммы.



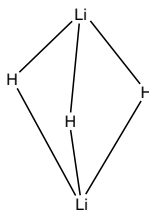
21. Определить, на сколько линий и с каким расстоянием между ними расщепится переход  $np^2 \Rightarrow np^1nd^1$  в случае j-j связи. Считать, что только основной терм начальной конфигурации.

22. Найти МО, основной терм и распределение спиновой плотности в радикале  $H_5$  ( $D_{4h}$ ). Считать, что  $\beta_{5i} = \sqrt{2}\beta_{ji} = \sqrt{2}\beta$ .

23. Определить основной терм молекулы тригидрида никеля  $NiH_3^{4+}$  (группа симметрии  $D_{3h}$ ). Учитывать только d-орбитали иона  $Ni^{4+}$ , электронная конфигурация которого -  $3d^6$ .

24. По теории возмущений определить вид и энергию нижней орбитали молекулы нафталина. Сравнить с решением по теории групп.

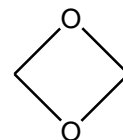
25. Определить направление преимущественной ориентации радикального ( $R^\bullet$ ), электрофильного ( $R^+$ ) и нуклеофильного ( $R^-$ ) замещения в молекуле мета-ксилола



26. Определить распределение спиновой плотности для бензильного радикала по теории возмущений, считая, что к  $\pi$ -системе бензола присоединяется  $CH_2$ -группа. Сравнить с решением для альтернантной системы.

27. Найти МО, основной терм и разрешенные переходы для плоской молекулы  $\text{Cu}^{2+}\text{X}_4$  ( $D_{4h}$ ), где X - атом, имеющий только  $p_z$  орбиталь с двумя электронами. Для определенности можно считать, что  $\alpha(\text{X}) > \alpha(\text{Cu})$  по величине.

28. Определить вид и энергии МО для молекулы 1,3 диоксиэтена. Считать  $k$  и  $h$  для кислорода равными единице, и что кислород вносит в  $\pi$ -систему 2 электрона.



$h$  для

### Пример экзаменационного билета

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)  Физический факультет
<b>ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____</b>  1. Определить терм конфигурации $p^2$ , к которому относится функция: $\psi = 1/2[(1+0)-(1-0+)+(0+1)-(0-1+)]$ . Ответ доказать. (на компетенцию ПК-1)  2. Определить основной терм молекулярного иона $\text{Fe}^{3+}\text{-Cu}^{3+}$ . Учитывать только d-орбитали металлов. Считать резонансные интегралы $\beta_\sigma > \beta_\pi > \beta_\delta$ . (на компетенцию ПК-2).  3. Определить основной терм, поляризацию и энергию переходов для молекулы $\text{Li}_2\text{H}_3^+$ , имеющей строение $D_{3h}$ . Считать, что $\alpha(\text{Li}) = \alpha(\text{H}) - \beta$ , где $\beta$ - резонансный интеграл для связи Li-H. Сколько линий будет в оптическом спектре поглощения? Какой основной терм будет для $\text{Li}_2\text{H}_3^+$ ? (на компетенции ПК-1, ПК-2).  Составитель _____ / Поздняков И. П. / (подпись)  « ____ » _____ 20 г.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации рабочей программы  
по дисциплине «Квантовая механика молекул»  
по направлению подготовки 03.03.02 Физика  
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного