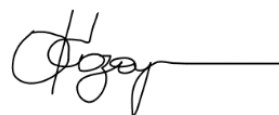


МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» (ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ:

Заведующий кафедрой физической химии



д.х.н., доц. О.А. Козадеров

30.04.2020

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА  
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Б1.О.19 Квантовая химия**

- 1. Код и наименование специальности:** 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
- 2. Специализация:** Фундаментальная химия в профессиональном образовании.
- 3. Квалификация выпускника:** Химик. Преподаватель химии
- 4. Форма обучения:** Очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** физической химии
- 6. Составители программы:** Нечаев Игорь Владимирович, к.х.н., доцент
- 7. Рекомендована:** Научно-методическим Советом химического факультета от 19.03.2020, протокол № 3
- 8. Учебный год:** 2022/2023 Семестр: 5

## 9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целями освоения учебной дисциплины являются:

- познакомить обучающихся с основными принципами и математическим аппаратом квантовой механики Шредингера;
- раскрыть принципы квантово-химического описания строения химических частиц (атомов, молекул, полимеров);
- научить интерпретировать результаты квантово-химических расчетов химических частиц;
- дать представление о возможностях квантово-химического моделирования.

### Задачи учебной дисциплины:

- познакомить обучающихся с основами и приближенными методами квантовой механики; с решением простейших квантово-механических задач; с основами метода и математическим аппаратом метода молекулярных орбиталей; с полуэмпирическими методами квантовой химии;
- дать понятие о квантово-химическом моделировании как методе химических исследований.

## 10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: обязательная часть блока Б1

**11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю** (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ОПК-1	Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	ОПК-1.1	Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	Знать: основные законы и формулы квантовой химии. Уметь: применять основные естественно-научные законы при осуждении экспериментальных результатов. Систематизировать и интерпретировать результаты эксперимента, а также результаты расчетных задач. Владеть: навыками использования знаний теоретических основ квантовой химии в применении к полученным результатам.
		ОПК-1.2	Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	

		ОПК-1.3	Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	ОПК-3.1	Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знать: принципы (постулаты) квантовой механики; основные приближения, используемые в квантовой химии; метод самосогласованного поля и его приложения к задачам квантовой химии; возможности основных методов квантовой химии и квантово-химического моделирования. Уметь: Решать несложные квантово-механические задачи; интерпретировать результаты квантово-механических расчетов движения частиц в заданных силовых полях; интерпретировать результаты квантово-химических расчетов молекул в общехимических терминах; делать выбор оптимального метода квантовой химии для расчета электронного строения конкретной молекулы; Владеть: программным обеспечением при решении квантово-химических задач, навыками практического использования законов квантовой механики и результатов квантово-химических расчетов молекул для предсказания макроскопических свойств химических веществ.
		ОПК-3.2	Использует стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности	

## 12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 5 / 180

Форма промежуточной аттестации экзамен

## 13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость			
		Всего	По семестрам		
			5 семестр	№ семестра	...
Аудиторные занятия, в том числе:		108	108		
в том числе:	лекции	36	36		
	практические	72	72		
	лабораторные				
	курсовая работа				
Самостоятельная работа		36	36		
Промежуточная аттестация		36	36		
Итого:		180	180		

### 13.1 Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК
1. Лекции			
1.1	Физические основы квантовой механики.	Классическая и квантовая механика. Квантовая механика – выдающееся открытие XX века. Квантовая химия. Экспериментальные основы квантовой механики. Волново-корпускулярный дуализм – основополагающая идея квантовой механики. Волна де Бройля. Статистическое толкование волн де Бройля. Основные постулаты квантовой механики. Уравнение Шредингера. Трактовка причинности в квантовых системах.	ЭУМК <a href="https://edu.vsu.ru/course/vHYPERLINK">Квантовая химия (ФПХ)</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/vHYPERLINK">https://edu.vsu.ru/course/vHYPERLINK</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">"https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893"</a>

1.2	Математические основы квантовой механики Шредингера.	<p>Оператор – квантовый аналог динамической переменной и оператора (Дирак). Алгебра операторов. Собственные функции и собственные значения операторов. Постулат о спектре квантово- механических операторов. Средние значения динамических переменных. Постулат о среднем.</p> <p>Вычисление вероятностей результатов экспериментальных измерений динамических переменных. Условие, при котором несколько динамических переменных могут быть измерены одновременно. Соотношение неопределенностей и следствия из него. Понятие о полном наборе динамических переменных. Операторы основных динамических переменных. Оператор Гамильтона. Свойства уравнения Шредингера. Уравнение Шредингера и закон сохранения числа частиц.</p> <p>Уравнение Шредингера для стационарных состояний.</p>	<a href="http://ew.php?id=9893">ew.php?id=9893</a>
1.3	Простейшие применения аппарата квантовой механики.	<p>Одномерное свободное движение. Движение в поле кусочно-постоянных потенциалов. Прохождение частиц через прямоугольный потенциальный барьер. Туннельный эффект. Особенности движения при наличии потенциальной стенки и потенциальной ямы. Движение в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими вертикальными стенками. Движение в потенциальном «ящике». Квантовая теория гармонического осциллятора. Квантовая теория жесткого ротатора.</p>	
1.4	Статистическое толкование квантовой механики.	<p>Производная оператора по времени. Теоремы Эренфеста и связь между классической и квантовой механикой. Квантовые интегралы движения.</p>	
1.5.	Движение в центральном поле. Атом водорода	<p>Общее рассмотрение движения в центральном поле. Полный набор динамических переменных. Теория жесткого ротатора и ее значение для физической химии. Уравнение Шредингера для водородоподобного атома. Радиальные и сферические функции. Квантовые числа <math>n</math>, <math>l</math> и <math>m</math>. Энергетический спектр атома водорода. Атомные орбитали. Электрический ток в атоме водорода.</p> <p>Понятие о пространственном квантовании.</p>	

1.6	Спин элементарных частиц. Тождественность частиц.	Спин электрона, протона, нейтрона, фотона. Спин- орбитальное взаимодействие и его проявления. Принцип тождественности частиц. Бозоны и фермионы. Оператор спина электрона. Спиновые функции. Волновая функция системы тождественных частиц.	
1.7	Приближенные методы квантовой механики. Одноэлектронная модель	Общий вид уравнения Шредингера для молекулы. Проблема многих тел. Адиабатическое приближение. Одноэлектронное приближение. Метод самосогласованного поля Хартри и его недостатки. Волновая функция и энергия многоэлектронной системы в одноэлектронном	
		приближении. Вариационный принцип в квантовой механике. Уравнения самосогласованного поля Хартри-Фока для молекул с замкнутой электронной оболочкой и метод их решения. Пределы применимости метода Хартри-Фока. Понятие о методе конфигурационного взаимодействия.	
1.8	Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	Способы решения проблемы многих тел в квантовой химии. Неэмпирические и полуэмпирические методы. Основные положения метода МО. Приближение ЛКАО. Выбор базисных функций для расчета. Уравнения Хартри-Фока на конечном базисе: метод ССП МО ЛКАО (К.Рутан). Пределы применимости метода. Энергия корреляции Принципы упрощения вычислительной процедуры в методе МО. Валентное приближение. Приближение нулевого дифференциального перекрытия (НДП). Понятие о полуэмпирических методах ССП МО ЛКАО и полуэмпирических несамосогласованных методах МО ЛКАО. Расширенный метод Хюккеля (РМХ) и простой метод Хюккеля (МОХ). Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии. Понятие о квантово-химическом моделировании и его возможностях. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.	ЭУМК <a href="https://edu.vsu.ru/course/vNUPERLINK">https://edu.vsu.ru/course/vNUPERLINK</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">"https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893"</a> <a href="http://ew.php?id=9893">ew.php?id=9893</a>
2. Практические занятия			

2.1	Физические основы квантовой механики	Решение задач по теме (длина волны де Бройля для электрона и макроскопических тел, фотоэффект, уравнения Н.Бора для движения электрона атома водорода).	ЭУМК <a href="https://edu.vsu.ru/course/vHUPERLINK">Квантовая химия (ФПХ)</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/vHUPERLINK">https://edu.vsu.ru/course/vHUPERLINK</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">"https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893"</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">i</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">ew.php?id=9893</a>
2.2	Алгебра операторов. Линейные самосопряженные операторы.	Понятие оператора. Ознакомление с математическими действиями над операторами. Отбор линейных самосопряженных операторов.	
2.3	Собственные функции и собственные значения операторов.	Решение задач на нахождение собственных функций и собственных значений операторов.	
2.4	Операторы основных динамических переменных. Сферическая система координат.	Ознакомление с операторами основных динамических переменных. Практическое определение коммутационных соотношений между операторами, в т. ч. в сферической системе координат.	
2.5	Волновая функция и ее свойства.	Ознакомление с понятием волновой функции частицы. Получение простейшей информации из волновой функции (графические работы).	
2.6	Простейшие задачи квантовой механики.	Рассмотрение решения уравнения Шредингера для простейших задач квантовой механики. Получение физической информации из решения уравнения Шредингера (графические работы).	
2.7	Движение частицы в центральном поле.	Рассмотрение решения уравнения Шредингера для жесткого ротатора. Получение физической информации из решения уравнения Шредингера (графические работы).	
2.8	Атом водорода.	Рассмотрение решения уравнения Шредингера для атома водорода. Получение физической информации из решения уравнения Шредингера (графические работы).	
2.9	Орбитали атома водорода.	Определение структуры электронных облаков атома водорода для основного и возбужденного состояний (графические работы).	
2.10	Молекулярное уравнение Шредингера	Построение молекулярного уравнения Шредингера для малых молекул. Проблема многих тел. Молекулярное уравнение Шредингера в адиабатическом приближении. Понятие одноэлектронного приближения в	

2.11	Самосогласованное поле	Вариационный принцип в квантовой механике. Уравнения Хартри-Фока, общий метод решения. Точность расчета многоэлектронных систем методом Хартри-Фока.	<a href="http://www.edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">.ru/course/view.php?id=9893</a> <a href="http://www.edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">"iew.php?id=9893</a>
2.12	Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии	Рассмотрение расчета простой молекулы методом Рутана. Рассмотрение расчета органической молекулы (C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , CH <sub>2</sub> O) расширенным методом Хюккеля или ППДП/2. Проблема возможности построения классической формулы (графические работы).	

### 13.2 Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Самостоятельная работа	Экзамен	Всего
1	Физические основы квантовой механики.	4	4	8		16
2	Математические основы квантовой механики Шредингера.	8	12	16		30
3	Простейшие применения аппарата квантовой механики.	8	12	16		30
4	Статистическое толкование квантовой механики	2	—	4		6
5	Движение в центральном поле. Атом водорода	6	12	12		24
6	Спин элементарных частиц. Тождественность частиц.	4	—	8		12
7	Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	4	22	8		36
	Итого:	36	72	36	36	180

### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Для освоения курса лекций необходимо ознакомиться с презентационными материалами по данному курсу. Они размещены на сайте [www.edu.vsu.ru](http://www.edu.vsu.ru) HYPERLINK "http://www.edu.vsu.ru/". Там же представлен план практических занятий.



Необходимо иметь хотя бы основную рекомендуемую литературу, а из числа дополнительной литературы - Сборник задач по квантовой механике : для студ. 2 курса д/о и 4 курса в/о хим. фак. / сост. : Е. М. Авербах, В. Ю. Кондрашин, В. Р. Пшестанчик. — Воронеж, 2001. — 41 с.

### 15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Ермаков А.И. Квантовая механика и квантовая химия / А.И. Ермаков : учеб. для студ. хим. фак. ун-тов. – М.: Юрайт, 2010. – 555 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
2	Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. Пособие / В.И. Барановский. — М. : Академия, 2008 .— 382 с.
3	Минкин В.И. Теория строения молекул : учеб. пособие для студ. вузов / В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев .— 2-е изд., перераб. и доп. — Ростов н/Д : Феникс, 1997 .— 557 с.
4	Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. для студ. хим. фак. ун-тов / Н.Ф.Степанов .— М. : Мир, 2006.— 518 с.
5	Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков : учеб. пособие для студ. хим. фак. ун-тов. — / А.М. Мелешина . — М. : Высш. шк, 1980. 215 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)\*:

№ п/п	Ресурс
6	Зональная научная библиотека <a href="http://www.lib.vsu.ru">www.lib.vsu.ru</a>
7	ЭУМК <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">Квантовая</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">HYPERLINK "https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893"</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">HYPERLINK "https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893"</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">химия</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">HYPERLINK "https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893"</a> <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">HYPERLINK "https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893"</a> (ФПХ) <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">HYPERLINK "https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893"</a>

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных), курсовых работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Двайт Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы / Г.Б. Двайт. – М. : Наука, 1966. – 228 с.
2	Сборник задач по квантовой механике : для студ. 2 курса д/о и 4 курса в/о хим. фак. / сост. : Е. М. Авербах, В. Ю. Кондрашин, В. Р. Пшестанчик. — Воронеж, 2001. — 41 с.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение:

Проведение вводной и обзорных лекций, решение задач по основным разделам курса. Подготовка к текущей и промежуточной аттестации с использованием рекомендуемой литературы. При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения и различные дистанционные образовательные технологии, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или “МООК ВГУ” (<https://mooc.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций (в том числе с применением сервисов Zoom, Discord и др.), взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров

#### 18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Учебная аудитория. Компьютерный кластер, компьютер, принтер.

#### 19. Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Физические основы квантовой механики	ОПК-1	ОПК-1.1	Практическое задание
2.	Математические основы квантовой механики Шредингера.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.1, 1.2 ОПК-3.1	Практическое задание
3.	Простейшие применения аппарата квантовой механики.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.1 ОПК-3.1, 3.2	Контрольная работа №1
4.	Статистическое толкование квантовой механики	ОПК-1	ОПК-1.1-1.3	Практическое задание
5.	Движение в центральном поле. Атом водорода	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.1-1.3 ОПК-3.1	Практическое задание
6.	Спин элементарных частиц. Тождественность частиц.	ОПК-1	ОПК-1.1	Практическое задание
7.	Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-3.2, 3.2	Практическое задание Контрольная работа №2
Промежуточная аттестация форма контроля - экзамен				Перечень вопросов Практическое задание

## **20. Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания**

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций. Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в формах устного опроса (фронтальная беседа) и письменных работ (выполнение практико-ориентированных заданий и контрольных работ). Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

### **20.1 Текущий контроль успеваемости**

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

#### **20.1.1 Перечень теоретических заданий**

1. Назвать основные постулаты квантовой механики.
2. Вычислить произведение двух заданных операторов.
3. Вычислить коммутатор двух заданных операторов.
4. Установить факт эрмитовости или неэрмитовости заданного оператора
5. Найти собственные функции и собственные значения заданного оператора.
6. Назвать полный набор физических величин в предложенной квантовой системе.
7. Найти коэффициент нормировки заданной волновой функции при заданных граничных условиях.
8. Извлечь физическую информацию из предложенной волновой функции.
9. Записать уравнение Шредингера для одной частицы, движущейся в заданном силовом поле (стационарные состояния).
10. Вычислить энергию частицы, движущейся в заданном силовом поле, на основе волновой функции.
11. Пояснить смысл пространственного квантования вектора момента импульса электрона, движущегося в центральном поле.
12. Доказать отсутствие электрического тока вдоль меридиана в атоме водорода.
13. Вычислить величину гиромагнитного отношения для электрона атома водорода.
14. Дать частичное или полное исследование структуры электронного облака атома водорода по предложенной атомной орбитали
15. Изобразить графически функции плотности вероятности нахождения электрона атома водорода.
16. Изобразить энергетическую диаграмму электрона в атоме водорода с учетом кратности вырождения энергетических уровней.
17. Вычислить средние значения потенциальной и кинетической энергий электрона в атоме водорода.
18. Построить диаграмму пространственного квантования вектора момента импульса электрона атома водорода.
19. Изобразить энергетическую диаграмму многоэлектронного атома с учетом кратности вырождения энергетических уровней электронов.
20. Записать уравнение Шредингера для предложенной молекулы.
21. Записать детерминант Слэтера для электронной оболочки молекулы.

22. Записать формулу для энергии многоэлектронной молекулы в одноэлектронном приближении.
23. Записать уравнение Хартри-Фока для предложенной многоэлектронной молекулы.
24. Записать уравнения Рутана для предложенной многоэлектронной молекулы.
25. На основе списка молекулярных орбиталей двухатомной молекулы установить тип симметрии каждой орбитали.
26. Преобразованием детерминанта Слэтера получить для молекулы  $\text{CH}_4$  локализованные молекулярные орбитали.
27. На основе списка молекулярных орбиталей несложной молекулы показать возможность (или невозможность) построения ее классической структурной формулы.
28. Указать источники ошибок расчета полной энергии молекулы по методу Рутана.
29. Используя следствие из теоремы Гельмана-Фейнмана, сравнить прочность связи в двух двухатомных молекулах.
- 30\*. Высказать соображения по квантово-химическому расчету геометрической структуры активированного комплекса в реакции между двумя простыми веществами.

### 20.1.2 Перечень практических заданий

1. Возвести в квадрат предложенный оператор.
2. Вычислить коммутатор двух предложенных операторов.
3. Доказать, является ли заданный оператор эрмитовым.
4. Найти собственные функции и собственные значения предложенного оператора.
5. Найти коэффициент нормировки заданной волновой функции.
6. Вычислить вероятность пребывания частицы в указанном пространстве на основе известной волновой функции.
7. Вычислить плотность потока вероятности частицы на основе известной волновой функции.
8. Вычислить плотность вероятности нахождения частицы в указанной точке пространства (в декартовой и в сферической системе координат).
9. Рассчитать среднее значение динамической переменной в заданном квантовом состоянии.
10. Назвать полный набор физических величин в заданном квантовом состоянии.
11. Провести полное исследование пространственного распределения электронной плотности в возбужденном состоянии атома водорода (до  $n = 3$  включительно).
12. На основе вида волновой функции электрона атома водорода, находящегося в возбужденном состоянии, указать направление внутриатомного электрического тока.
13. Указать значения всех динамических переменных, характеризующих состояние электрона атома водорода в заданном энергетическом состоянии.
14. Выбрать приемлемый полуэмпирический метод для расчета энергетических уровней и (или) молекулярных орбиталей предложенной молекулы.
15. Определить источники ошибок и оценить точность расчета электронной энергии молекулы по методу Рутана.
16. На основе предложенных молекулярных орбиталей простой молекулы ( $\text{CH}_2\text{O}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ) записать ее классическую структурную формулу.
17. Провести исследование симметрии любой молекулярной орбитали двухатомной гомоядерной молекулы.
18. На основе предложенных молекулярных орбиталей двухатомной гомоядерной молекулы вычислить кратность химической связи.
19. Продемонстрировать применение теоремы Гельмана-Фейнмана к оценке прочности химической связи в двухатомной молекуле.
20. Привести пример практического использования теоремы Яна-Теллера.

### 20.1.3. Примеры заданий для контрольных работ

#### Контрольная работа № 1

1. Доказать коммутаторное соотношение для операторов A, B, C:  
 $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ .
2. Найти собственные функции и собственные значения операторов:

$$x + i \frac{d}{dx}; \quad ix + i \frac{d}{dx}; \quad x^3 + i \frac{d}{dx}.$$

3. Непосредственным вычислением установить, ортогональны ли собственные функции оператора

$$A = i \frac{d}{dx} + 1,$$

принадлежащие разным собственным значениям. Ответ комментировать.

#### Контрольная работа № 2

1. Частица находится в основном состоянии линейного гармонического осциллятора:  
 $\psi(x) = (m\omega_0/\pi\hbar)^{1/4} \exp(-m\omega_0 x^2/2\hbar)$ .  
Найти вероятность обнаружения частицы в области, запрещенной для классического движения.

Частица находится в состоянии, описываемом волновой функцией  $\psi(x)$ . Разложение  $\psi(x)$  по собственным функциям оператора A имеет вид:

$$\psi(x) = 0,87f_2 + 0,50f_4 + 0,71f_5.$$

Какие значения динамической переменной A могут появиться при ее измерении и с какими вероятностями?

2. Дана пара комплексных орбиталей атома водорода:

$$\psi_{32\pm 2} = Ar^2 e^{-r/3a} \sin^2\Theta \cdot e^{\pm 2i\varphi},$$

a – радиус первой боровской орбиты.

- а) Провести полное исследование одной из этих орбиталей, построив необходимые иллюстрации в эскизной форме:  $W_{nl}(r)$ ,  $W_{lm}(\Theta)$ , «фотографию» электронного облака.
- б) Перейти к действительной атомной орбитали  $\psi_{32\pm 2}$  и повторить ее исследование.
- в) Установить знаки действительной атомной орбитали в пространстве.

### 20.1.4 Тестовые задания

ОПК-3

1. Определите импульс фотона (кг·м)/с, длина волны которого  $3,01 \cdot 10^{-8}$  м?

( $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$  Дж·с)

1.  $2,20 \cdot 10^{-26}$ ;
2.  $19,93 \cdot 10^{-42}$ ;
3.  $2,20 \cdot 10^{-42}$ ;
4.  $19,93 \cdot 10^{-26}$ .

2. Две физические величины могут быть одновременно измерены в одном эксперименте с точностью, ограниченной лишь возможностью измерительных приборов в том случае, если ...

1. их операторы коммутируют с оператором Гамильтона;
2. полная энергия системы постоянна;
3. силовые поля не зависят от времени;
4. их операторы коммутируют между собой.

3. Вырождение состояний связано с ...

1. свойством непрерывности волновой функции;
2. граничными условиями, накладываемыми на волновую функцию;
3. симметрией решаемой задачи;
4. свойством непрерывности производной волновой функции.

4. Для одномерного гармонического осциллятора разница в энергии между соседними уровнями ...

1. растёт с увеличением энергии;
2. постоянна;
3. падает с увеличением энергии;
4. равна нулю.

5. Туннельный эффект это ...

1. преодоление микрочастицей потенциального барьера в случае, когда её полная энергия равна высоте барьера;
2. преодоление микрочастицей потенциального барьера в случае, когда её полная энергия больше высоты барьера;
3. преодоление микрочастицей потенциального барьера в случае, когда её полная энергия меньше высоты барьера;
4. отражение микрочастицы от потенциального барьера.

6. Особенность вариационного метода Ритца в том, что ...

1. в пробную функцию  $f$  вводят несколько независимых параметров;
2. полная энергия системы получается при решении векового уравнения;
3. пробная функция  $f$  берётся в виде линейной комбинации независимых функций;
4. интегралы перекрывания считаются равными нулю.

7. Особенность метода Хартри-Фока в том, что ...

1. одноэлектронные уравнения решаются вариационным методом;
2. для решения задачи используют метод последовательных приближений;
3. полученные полные волновые функции могут быть только антисимметричными;
4. у одноэлектронных функций не могут совпадать все четыре квантовых числа.

## Ключи к тесту ОПК-3

Вопросы	1	2	3	4	5
Ответы	1	4	3	2	3
Вопросы	6	7			
Ответы	3	2			

### Вопросы, требующие короткого ответа (одно слово)

1. В каких единицах измеряется постоянная Планка?

Ответ: Дж·с

2. Собственный момент импульса элементарной частицы - это...

Ответ: спин

3. Чем обусловлено квантование физических величин?

Ответ: граничными условиями, накладываемыми на волновую функцию

### Вопросы, требующие развернутого ответа.

1. В чём суть адиабатического приближения в квантовой химии? Напишите стационарное уравнение Шрёдингера для молекулы в адиабатическом приближении.

Эталон ответа:

Адиабатическое приближение в квантовой химии представляет собой разделение системы на тяжёлые и лёгкие частицы — ядра и электроны. Поскольку масса любого ядра значительно больше массе электрона, оказывается что электроны — значительно более быстрая подсистема, чем ядра. Можно считать, что электроны движутся в поле неподвижных ядер.

$$(T_{\text{эл}} - U_{\text{эл-яд}} + U_{\text{эл-эл}})\Psi = (E - \epsilon)\Psi$$

Критерии оценивания:

10 баллов: правильно отражена суть адиабатического приближения и написано уравнение Шрёдингера

5 баллов: правильно отражена суть адиабатического приближения, но не написано уравнение Шрёдингера

3 балла: написано уравнение Шрёдингера, но не отражена суть адиабатического приближения

0 баллов: дан неверный ответ

2. В чём суть одноэлектронного приближения в методе Хартри-Фока? Как представляется оператор отталкивания электронов в данном приближении?

Эталон ответа:

Из всего коллектива электронов выделяется один и считается, что действие всех остальных электронов на этот выбранный можно приближённо описать действием усреднённого силового поля, в котором потенциальная энергия выбранного электрона зависит только от его собственных координат.

$$U_{\text{эл-эл}} = \Sigma(U_i(x_i, y_i, z_i))$$

Критерии оценивания:

10 баллов: правильно отражена суть одноэлектронного приближения и написан оператор отталкивания электронов

5 баллов: правильно отражена суть одноэлектронного приближения, но не написан оператор отталкивания электронов

3 балла: написан оператор отталкивания электронов, но не отражена суть одноэлектронного приближения

0 баллов: дан неверный ответ

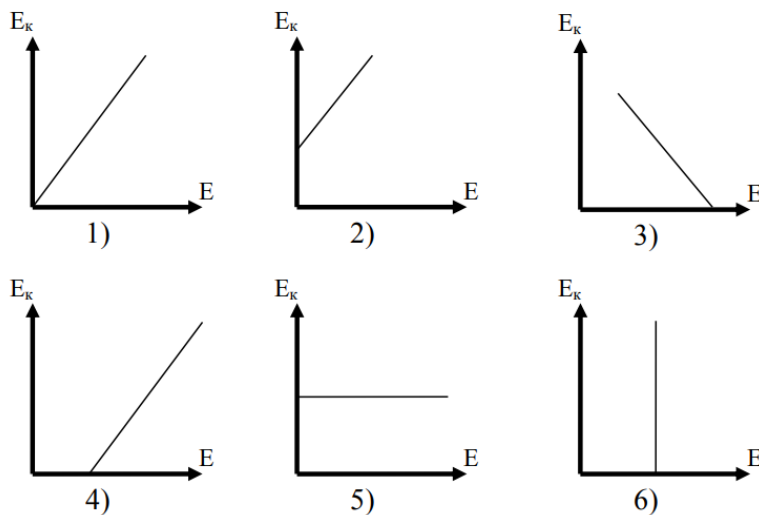
#### ОПК-4

1. Какому условию должна удовлетворять длина волны света  $\lambda$ , падающего на поверхность металла, чтобы началось явление фотоэффекта?

$A$  — работа выхода электрона;  $h$  — постоянная Планка;  $\nu$  — частота;  $E_k$  — энергия электрона.

1.  $\lambda \geq A/h$ ;
2.  $\lambda \leq hc/A$ ;
3.  $\lambda > E_k/h$ ;
4.  $\lambda > hc/A$ .

2. На каком из приведенных графиков правильно отражена зависимость максимальной кинетической энергии ( $E_k$ ) электрона, вылетающего с поверхности металла, от энергии фотона ( $E$ ), падающего на поверхность металла?



3. Какое из перечисленных ниже оптических явлений получило объяснение на основе квантовой теории света?

1. дифракция;
2. дисперсия;
3. фотоэффект;
4. интерференция.



4. Принцип неопределённости Гейзенберга в квантовой механике устанавливает предел точности одновременного определения пары характеризующих систему наблюдаемых величин, описываемых...

1. током и напряжением;
2. силовыми полями;
3. некоммутирующими операторами;
4. координатой и импульсом.

5. Гипотеза Луи де Бройля состоит в том, что ...

1. все частицы обладают волновыми свойствами;
2. свет представляет собой совокупность частиц (квантов, фотонов);
3. свет — это электромагнитная волна;
4. каждой волне можно поставить в соответствие виртуальную частицу.

6. Волновая функция дает возможность ...

1. предсказать, какие значения всех измеряемых величин будут наблюдаться на опыте и с какой вероятностью;
2. описать траекторию движения частицы;
3. получить информацию о значении координат и импульса частицы;
4. получить информацию о значениях кинетической и потенциальной энергии частицы.

7. При измерении физической величины будет получаться одно и то же значение, если ...

1. оператор этой физической величины коммутирует с оператором Гамильтона;
2. система находится в стационарном состоянии;
3. силовые поля не зависят от времени;
4. волновая функция является собственной функцией оператора этой физической величины.

Ключи к тесту ОПК-4

Вопросы	1	2	3	4	5
Ответы	2	4	3	3	1
Вопросы	6	7			
Ответы	2	4			

Вопросы, требующие короткого ответа (одно слово)

1. Как изменится максимальная энергия фотоэлектронов, если, не меняя частоты падающего света, увеличить его интенсивность в два раза?

Ответ: не изменится

2. Для наблюдения спектральных линий атома водорода, находящихся в видимой части спектра, необходим переход электрона с вышележащих энергетических уровней на ... уровень. Добавьте пропущенное слово - порядковый номер уровня.

Ответ: на первый

3. Укажите основную характеристику для потенциальной энергии частицы, движущейся в центральном поле.

Ответ: потенциальная энергия движущейся частицы зависит только от расстояния до силового центра

Вопросы, требующие развернутого ответа

1. Жёсткий ротатор находится в состоянии с орбитальным квантовым числом  $l = 2$ . Какова кратность вырождения данного состояния? Чему равны возможные значения проекции момента импульса на ось  $z$ ?

Эталон ответа:

Кратность вырождения равна 5.

возможные значения проекции момента импульса на ось  $z$ :  $-2\hbar, -\hbar, 0, \hbar, 2\hbar$ .

Критерии оценивания:

10 баллов: правильно определена кратность вырождения и возможные значения проекции момента импульса на ось  $z$

5 баллов: правильно определена кратность вырождения, но не определены возможные значения проекции момента импульса на ось  $z$

0 баллов: дан неверный ответ

2. Частица массой  $m$  находится в трёхмерной кубической потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Как определить, какая комбинация квантовых чисел  $n_1, n_2$  и  $n_3$  соответствует энергетическому уровню №  $k$ ? Определите кратность вырождения энергетического уровня № 7 и его квантовые числа.

Эталон ответа:

Чтобы определить комбинацию квантовых чисел  $n_1, n_2$  и  $n_3$ , соответствующую энергетическому уровню №  $k$ , необходимо найти  $k$ -ую по величине сумму их квадратов. Кратность вырождения энергетического уровня № 7 равна 3. Возможные комбинации квантовых чисел: 2,2,3; 2,3,2; 3,2,2.

Критерии оценивания:

10 баллов: правильно описан метод определения комбинации квантовых чисел, соответствующих энергетическому уровню №  $k$ , определена кратность вырождения 7-го уровня и комбинации квантовых чисел.

5 баллов: правильно описан метод определения комбинации квантовых чисел, соответствующих энергетическому уровню №  $k$ , но не определена кратность вырождения 7-го уровня и комбинации квантовых чисел

0 баллов: дан неверный ответ

3. Как получить явный вид оператора заданной физической величины? Получите явный вид оператора проекции скорости на ось  $x$ .

Эталон ответа:

Чтобы получить явный вид оператора заданной физической величины, нужно использовать соотношения между физическими величинами из классической механики и первичные операторы, явный вид которых постулирован.

Соотношение между проекциями скорости и импульса на ось  $x$  из классической механики  $V_x = P_x/m$ .

Оператор  $V_x = -i\hbar/m \cdot \partial/\partial x$

Критерии оценивания:

10 баллов: правильно описан способ получения явного вида оператора заданной физической величины, найден оператор проекции скорости на ось  $x$ .

5 баллов: правильно описан способ получения явного вида оператора заданной физической величины, но не найден оператор проекции скорости на ось  $x$

0 баллов: дан неверный ответ

## 20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования. Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний и степень сформированности умений и навыков в области физической химии. При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены ниже.

При реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий оценки за экзамен/зачет могут быть выставлены по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре.

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

### Перечень вопросов к экзамену:

Элементарная квантовая теория света Эйнштейна. Волново-корпускулярный дуализм для света.

Волна де Бройля. Физическое толкование волны де Бройля.

Понятие состояния в квантовой механике.

Понятие волновой функции. Свойства волновой функции.

Уравнение Шредингера как постулат квантовой механики. Основные свойства уравнения.

Принцип суперпозиции состояний.

Понятие оператора. Линейные самосопряженные операторы.

Алгебра операторов (определение основных понятий).

Собственные функции и собственные значения операторов (определение понятий).

Теорема о собственных значениях самосопряженных операторов.

Теорема о собственных функциях самосопряженного оператора.

Теорема о полноте собственных функций оператора.

Теоремы о собственных функциях коммутирующих операторов.

Средние значения динамических переменных. Постулат о среднем.

Вероятность определенного значения динамической переменной в измерении.

Условие, при котором несколько динамических переменных могут быть измерены одновременно. Понятие полного набора физических величин.

Соотношение неопределенностей. Принцип неопределенности Гейзенберга.

Операторы основных динамических переменных. Принцип соответствия.

Функция Гамильтона. Оператор Гамильтона. Оператор полной энергии.

Понятие стационарного состояния. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.

Уравнение Шредингера и закон сохранения числа частиц. Вектор плотности потока вероятности.

Одномерное свободное движение. Волна де Бройля.  
 Движение частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими вертикальными стенками.  
 Движение частицы в трехмерном потенциальном «ящике».  
 Прохождение частицы через прямоугольный потенциальный барьер. Туннельный эффект.  
 Элементарная квантовая теория гармонического осциллятора.  
 Общая характеристика движения в центральном поле.  
 Квантовая теория жесткого ротатора и ее значение для физической химии.  
 Уравнение Шредингера для атома водорода. Принцип решения. Энергетический спектр атома водорода.  
 Волновые функции электрона атома водорода. Распределение электронной плотности в атоме водорода.  
 Действительные орбитали атома водорода.  
 Физический смысл квантового числа  $l$  в атоме водорода.  
 Физический смысл квантового числа  $m_l$  в атоме водорода.  
 Токи в атоме водорода. Гиромагнитное отношение.  
 Спин микрочастицы. Оператор спина электрона. Спиновые функции электрона.  
 Волновая функция системы частиц. Принцип тождественности частиц.  
 Волновая функция системы тождественных частиц для бозонов и для фермионов.  
 Уравнение Шредингера для молекулы. Адиабатическое приближение.  
 Понятие об одноэлектронном приближении. Метод ССП Хартри и его недостатки.  
 Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении.  
 Детерминант Слэтера.  
 Энергия многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении.  
 Вариационный принцип в квантовой механике.  
 Метод ССП Хартри-Фока. Уравнение Хартри-Фока для замкнутых электронных оболочек.  
 Основные положения метода молекулярных орбиталей. Приближение МО ЛКАО.  
 Выбор базисных функций в методе МО ЛКАО. Функции Слэтера и функции Гаусса.  
 Уравнения ССП на конечном базисе. Метод Рутана.  
 Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии. Валентное приближение.  
 Расширенный метод Хюккеля.  
 Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии.  $\pi$ - $5:V@>==>5$  приближение.  
 Простой метод Хюккеля (метод МОХ) и его возможности.  
 Гибридизация атомных орбиталей в методе МО.  
 Теорема Гельмана-Фейнмана и критерий прочности химической связи.

### Пример КИМ

УТВЕРЖДАЮ:

Заведующий кафедрой физической химии д.х.н., доц. \_

О.А. Козадеров  
\_ .20

Направление подготовки / специальность 04.05.01 ФПХ Дисциплина Квантовая химия  
 Форма обучения очная Вид контроля экзамен  
 Вид аттестации промежуточный

## Контрольно измерительный материал № 1

1. Понятие волновой функции. Свойства волновой функции.
2. Физический смысл квантового числа  $l$  в атоме водорода.

Преподаватель      Нечаев И.В.

### Критерии оценивания компетенций при промежуточной аттестации

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом квантовой механики и квантовой химии; умеет мыслить в терминах квантовой науки; способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований; применять теоретические знания для решения практических задач в области квантовой химии.	Повышенный уровень	Отлично
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует только одному из перечисленных показателей, но обучающийся дает правильные ответы на дополнительные вопросы. Содержатся отдельные недочеты при решении задач на вычисление (дифференцирование, интегрирование).	Базовый уровень	Хорошо
Обучающийся частично владеет теоретическими основами дисциплины, показывая фрагментарное владение программой курса. Неуверенно применяет теоретические знания для решения практических задач в области квантовой химии. Не умеет решать задачи на вычисления.	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допуская при ответе грубые ошибки. К освоению учебной дисциплины «Строение вещества» не подготовлен.	–	Неудовлетворительно

Задания раздела 20.1.4 рекомендуются к использованию при проведении диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения данной дисциплины