

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

**УТВЕРЖДАЮ:**

Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. А.В. Введенский



20.05.2019

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Б1.В.05 Квантовая химия**

**1. Код и наименование направления подготовки/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:** Кондрашин Владимир Юрьевич, к.х.н., доцент

**7. Рекомендована:** Научно-методическим Советом химического факультета  
от 18.04.2019, протокол №4

**8. Учебный год:** 2020/2021

**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:

| Компетенция |  | Планируемые результаты обучения   |
|-------------|--|---|
| Код         | Название   |   |
| ОПК-1       | Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач | <p>Знать: Основные приближения, используемые в квантовой химии; метод самосогласованного поля и его приложения к задачам квантовой химии; возможности неэмпирических и основных полуэмпирических методов квантовой химии, а также квантово-химического моделирования.</p> <p>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.</p> <p>Иметь навыки практического использования законов квантовой механики и результатов квантово-химических расчетов молекул для предсказания макроскопических свойств химических веществ.</p> |
| ПК-3        | Владение системой фундаментальных химических понятий   | <p>Знать: Квантово-механические аналоги классических химических понятий (химической связи, кратности связи, полярности связи и др.).</p> <p>Уметь: Получать необходимую квантово-химическую информацию о строении и свойствах химических веществ; использовать данные об электронном строении отдельных молекул для предсказания макроскопических свойств химических веществ и их реакционной способности.</p> <p>Иметь навыки в выборе необходимых положений квантовой механики и методов квантовой химии для решения поставленных химических и физико-химических задач</p>  |

## 12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 4 /144

### Форма промежуточной аттестации экзамен

## 13. Трудоемкость по видам учебной работы

| Вид учебной работы                  |                 | Трудоемкость |              |            |     |
|-------------------------------------|-----------------|--------------|--------------|------------|-----|
|                                     |                 | Всего        | По семестрам |            |     |
|                                     |                 |              | 5 семестр    | № семестра | ... |
| Аудиторные занятия,<br>в том числе: |                 | 68           | 68           |            |     |
| в том числе:                        | лекции          | 34           | 34           |            |     |
|                                     | практические    | 34           | 34           |            |     |
|                                     | лабораторные    |              |              |            |     |
|                                     | курсовая работа |              |              |            |     |
| Самостоятельная работа              |                 | 40           | 40           |            |     |
| Промежуточная аттестация            |                 | 36           | 36           |            |     |
| Итого:                              |                 | 144          | 144          |            |     |

### 13.1. Содержание дисциплины

| п/п              | Наименование раздела дисциплины                      | Содержание раздела дисциплины   | Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК  |
|------------------|--|---|---|
| <b>1. Лекции</b> |  |   |   |
| 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<br><a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">Квантовая химия (ФПХ)</a><br><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. | 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. 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. Уравнение Шредингера для стационарных состояний. |   |
| 1.3              | Простейшие применения                                | Одномерное свободное движение. Движение в   |   |

|      |  |   |   |
|------|--|---|---|
|      | аппарата квантовой механики.   | 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.  |   |
| 1.4  | Статистическое толкование квантовой механики.                              | Производная оператора по времени. Теоремы Эренфеста и связь между классической и квантовой механикой. Квантовые интегралы движения.   |   |
| 1.5. | Движение в центральном поле. Атом водорода                                 | 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 $n$ , $l$ и $m$ . Энергетический спектр атома водорода. Атомные орбитали. Электрический ток в атоме водорода. Понятие о пространственном квантовании.  | ЭУМК<br><a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">Квантовая химия (ФПХ)</a><br><a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893</a> |
| 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. $\pi$ -Электронное приближение. Приближение нулевого дифференциального перекрытия (НДП). Понятие о полуэмпирических методах ССП МО ЛКАО и полуэмпирических самосогласованных 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. |   |

| 2. Практические занятия |  |   | ЭУМК<br>Квантовая<br>химия<br>(ФПХ)<br><a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893</a> |
|-------------------------|--|---|--|
| 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).   |  |
| 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.   |  |
| 2.11                    | Самосогласованное поле   | Вариационный принцип в квантовой механике. Уравнения Хартри-Фока, общий метод решения. Точность расчета многоэлектронных систем методом Хартри-Фока.  |  |
| 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) |              |              |                        | Всего |
|-------|--|---------------------------------|--------------|--------------|------------------------|-------|
|       |  | Лекции                          | Практические | Лабораторные | Самостоятельная работа |       |
| 1     | Физические основы квантовой механики.                | 2                               | —            | —            | 6                      | 8     |
| 2     | Математические основы квантовой механики Шредингера. | 6                               |              | 6            | 10                     | 22    |
| 3     | Простейшие применения аппарата квантовой             | 4                               |              | 4            | 10                     | 18    |

|   |  |    |  |    |    |     |
|---|--|----|--|----|----|-----|
|   | механики.  |    |  |    |    |     |
| 4 | Статистическое толкование квантовой механики                               | 2  |  | 2  | 10 | 14  |
| 5 | Движение в центральном поле. Атом водорода                                 | 8  |  | 6  | 10 | 24  |
| 6 | Спин элементарных частиц. Тожественность частиц.                           | 2  |  | 4  | 10 | 16  |
| 7 | Приближенные методы квантовой механики. Одноэлектронная модель             | 4  |  | 6  | 10 | 20  |
| 8 | Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля. | 4  |  | 6  | 10 | 20  |
|   | Итого:   | 34 |  | 34 | 76 | 144 |

#### 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). 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="http://www.edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">Квантовая химия (ФПХ)</a><br><a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9893">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:**

Компьютерный кластер, компьютер, принтер. Хорошая доска в аудитории.

**19. Фонд оценочных средств:**

**Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения**

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

| № п/п             | Наименование раздела дисциплины (модуля)                                   | Компетенция(и)       | Оценочные средства                            |
|-------------------|--|----------------------|---|
| 1.                | Физические основы квантовой механики                                       | ОПК-1                | Практическое задание                          |
| 2.                | Математические основы квантовой механики Шредингера.                       | ОПК-1<br>ПК-3        | Практическое задание                          |
| 3.                | Простейшие применения аппарата квантовой механики.                         | ОПК-1<br>ПК-3        | Контрольная работа №1                         |
| 4.                | Статистическое толкование квантовой механики                               | ОПК-1                | Практическое задание                          |
| 5.                | Движение в центральном поле. Атом водорода                                 | ОПК-1<br>ПК-3        | Практическое задание                          |
| 6.                | Спин элементарных частиц. Тождественность частиц.                          | ОПК-3                | Практическое задание                          |
| 7.                | Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля. | ОПК-1<br>ПК-3        | Практическое задание<br>Контрольная работа №2 |
| Перечень вопросов |  | Практическое задание |   |

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

### 19.1.1. Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

### 19.1.2. Перечень практических 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:  $|\psi(r, \theta, \varphi)|^2$ ,  $r^2 R^2(n, l)$  и  $|Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2$ .
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.

### 19.1.3 Перечень заданий для контрольных работ

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.

#### 19.1.4. Контрольные работы

##### 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.

2. 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:

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

$a$  – радиус первой боровской орбиты.

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

## 19.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

### 19.2.1 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.

27. Общая характеристика движения в центральном поле.
28. Квантовая теория жесткого ротатора и ее значение для физической химии.
29. Уравнение Шредингера для атома водорода. Принцип решения. Энергетический спектр атома водорода.
30. Волновые функции электрона атома водорода. Распределение электронной плотности в атоме водорода.
31. Действительные орбитали атома водорода.
32. Физический смысл квантового числа  $l$  в атоме водорода.
33. Физический смысл квантового числа  $m_l$  в атоме водорода.
34. Токи в атоме водорода. Гиромагнитное отношение.
35. Спин микрочастицы. Оператор спина электрона. Спиновые функции электрона.
36. Волновая функция системы частиц. Принцип тождественности частиц.
37. Волновая функция системы тождественных частиц для бозонов и для фермионов.
38. Уравнение Шредингера для молекулы. Адиабатическое приближение.
39. Понятие об одноэлектронном приближении. Метод ССП Хартри и его недостатки.
40. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении. Детерминант Слэтера.
41. Энергия многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении.
42. Вариационный принцип в квантовой механике.
43. Метод ССП Хартри-Фока. Уравнение Хартри-Фока для замкнутых электронных оболочек.
44. Основные положения метода молекулярных орбиталей. Приближение МО ЛКАО.
45. Выбор базисных функций в методе МО ЛКАО. Функции Слэтера и функции Гаусса.
46. Уравнения ССП на конечном базисе. Метод Рутана.
47. Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии. Валентное приближение. Расширенный метод Хюккеля.
48. Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии.  $\pi$ -Электронное приближение. Простой метод Хюккеля (метод МОХ) и его возможности.
49. Гибридизация атомных орбиталей в методе МО.
50. Теорема Гельмана-Фейнмана и критерий прочности химической связи.

### 19.2.2. Комплект КИМ

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

**Контрольно измерительный материал № 2**

1. Принцип суперпозиции состояний.
2. Вариационный принцип в квантовой механике.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

**Контрольно измерительный материал № 3**

1. Уравнение Шредингера как постулат квантовой механики. Основные свойства уравнения.
2. Общая характеристика движения в центральном поле.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

**Контрольно измерительный материал № 4**

1. Собственные функции и собственные значения операторов (определение понятий).
2. Уравнения ССП на конечном базисе. Метод Рутана.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

Направление подготовки / специальность 04.05.01 ФПХ

Дисциплина Квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

### Контрольно измерительный материал № 5

1. Теорема о собственных значениях самосопряженных операторов.
2. Действительные орбитали атома водорода.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

Направление подготовки / специальность 04.05.01 ФПХ

Дисциплина Квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

### Контрольно измерительный материал № 6

1. Средние значения динамических переменных. Постулат о среднем.
2. Токи в атоме водорода. Гиромангнитное отношение.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

Направление подготовки / специальность 04.05.01 ФПХ

Дисциплина Квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

### Контрольно измерительный материал № 7

1. Вероятность определенного значения динамической переменной в измерении.
2. Элементарная квантовая теория гармонического осциллятора.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

### Контрольно измерительный материал № 8

1. Условие, при котором несколько динамических переменных могут быть измерены одновременно. Понятие полного набора физических величин.
2. Уравнение Шредингера для атома водорода. Принцип решения. Энергетический спектр атома водорода.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

### Контрольно измерительный материал № 9

1. Соотношение неопределенностей. Принцип неопределенности Гейзенберга.
2. Прохождение частицы через прямоугольный потенциальный барьер. Туннельный эффект.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

### Контрольно измерительный материал № 10

1. Операторы основных динамических переменных. Принцип соответствия.
2. Метод ССП Хартри-Фока. Уравнение Хартри-Фока для замкнутых электронных оболочек.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

**Контрольно измерительный материал № 11**

1. Функция Гамильтона. Оператор Гамильтона. Оператор полной энергии.
2. Понятие об одноэлектронном приближении. Метод ССП Хартри и его недостатки.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

**Контрольно измерительный материал № 12**

1. Понятие стационарного состояния. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.
2. Волновая функция системы частиц. Принцип тождественности частиц.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

**Контрольно измерительный материал № 13**

1. Уравнение Шредингера и закон сохранения числа частиц. Вектор плотности потока вероятности.
2. Выбор базисных функций в методе МО ЛКАО. Функции Слэтера и функции Гаусса.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

**Контрольно измерительный материал № 14**

1. Одномерное свободное движение. Волна де Бройля.
2. Спин микрочастицы. Оператор спина электрона. Спиновые функции электрона.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

**Контрольно измерительный материал № 15**

1. Движение частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими вертикальными стенками.
2. Уравнение Шредингера для молекулы. Адиабатическое приближение.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

**Контрольно измерительный материал № 16**

1. Движение частицы в трехмерном потенциальном «ящике».
2. Энергия многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---



УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

### Контрольно измерительный материал № 17

1. Волновые функции электрона атома водорода. Распределение электронной плотности в атоме водорода.
2. Основные положения метода молекулярных орбиталей. Приближение МО ЛКАО.

\_\_\_\_\_  
Преподаватель

\_\_\_\_\_  
Кондрашин В.Ю.

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

### Контрольно измерительный материал № 18

1. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении. Детерминант Слэтера.
2. Гибридизация атомных орбиталей в методе МО.

\_\_\_\_\_  
Преподаватель

\_\_\_\_\_  
Кондрашин В.Ю.

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

### Контрольно измерительный материал № 19

1. Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии. Валентное приближение. Расширенный метод Хюккеля.
2. Теорема Гельмана-Фейнмана и критерий прочности химической связи.

\_\_\_\_\_  
Преподаватель

\_\_\_\_\_  
Кондрашин В.Ю.

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

### Контрольно измерительный материал № 20

1. Квантовая теория жесткого ротатора.
2. Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии.  $\pi$ -Электронное приближение. Простой метод Хюккеля (МОХ) и его возможности.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

### Контрольно измерительный материал № 21

1. Теорема о собственных функциях самосопряженного оператора.
2. Волновая функция системы тождественных частиц для бозонов и для фермионов.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

### Контрольно измерительный материал № 22

1. Теоремы о собственных функциях коммутирующих операторов.
2. Волновая функция системы тождественных частиц для бозонов и для фермионов.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019  
Направление подготовки / специальность 04.05.01 ФПХ

Дисциплина Квантовая химия  
Форма обучения очная  
Вид контроля экзамен

### Контрольно измерительный материал № 23

1. Теорема о полноте собственных функций оператора.
2. Гибридизация атомных орбиталей в методе МО.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

### Контрольно измерительный материал № 24

1. Теоремы о собственных функциях коммутирующих операторов.
2. Физический смысл квантового числа  $m_l$  в атоме водорода.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_ А.В. Введенский

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 2019

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

### Контрольно измерительный материал № 25

1. Функция Гамильтона. Оператор Гамильтона. Оператор полной энергии.
2. Квантовая теория жесткого ротатора и ее значение для физической химии.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

---

### 19.3. Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) 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 |

### 19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

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).

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 выше.

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