

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
материаловедения и индустрии наносистем
Академик РАН


В.М. Иевлев
подпись, расшифровка подписи

21.04.2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.О.17 Основы квантовой механики

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:** 04.03.02 Химия, физика и механика материалов
- 2. Профиль подготовки/специализация:** материаловедение и индустрия наносистем
- 3. Квалификация выпускника:** бакалавр
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** кафедра материаловедения и индустрии наносистем
- 6. Составители программы:** Даринский Борис Михайлович, доктор физико-математических наук профессор
- 7. Рекомендована:** научно-методическим советом химического факультета, протокол №3 от 19.04.2022

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2024-2025

Семестр(ы): 5

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Целью – изучение студентами основных понятий, специфики квантового движения электронов, ознакомление с достижениями и перспективами современной физики электронных систем, достижение понимания связи макросвойств вещества и движения микрочастиц.

Основные задачи изучения дисциплины:

– формирование у студентов необходимых знаний и понимания основных законов, определяющих квантовые свойства микрочастиц ;

- формирование понимания механизма возникновения макроскопических свойств материалов как следствия движения микрочастиц, эргодичности системы многих частиц.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Б1. Обязательная часть.

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-3	Способен использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области математических и смежных естественных наук	ОПК-3.1	Использует базовые знания в области математики и физики при решении задач материаловедения	Знать: методы описания электронной структуры атомов, основные закономерности изменения характеристик атомов в таблице Менделеева, квантовые модели электронной структуры уметь: использовать знания для построения моделей, проведения компьютерных расчетов и интерпретации полученных результатов молекул, нанокластеров и кристаллических твердых тел. Владеть: навыками проведения самостоятельных исследований в области теоретических расчетов молекулярных и твердотельных систем, интерпретации экспериментальных результатов на основе представлений об электронном строении объекта.
		ОПК-3.2.	Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик	знать: методы квантового расчета и интерпретации результатов для молекул и твердых тел. Уметь: использовать знания для построения моделей, проведения компьютерных расчетов и интерпретации полученных результатов молекул, нанокластеров и кристаллических твердых тел. Владеть: навыками интерпретации экспериментальных результатов на основе представлений об электронном строении объекта.
		ОПК-3.3.	Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	знать: Классификацию различных методов компьютерных расчетов молекул и твердых тел, методики проведения расчетов, интерпретацию полученных результатов. Уметь: использовать знания для адекватной постановки задач, проведения расчетов, интерпретации результатов. Владеть:

				навыками проведения самостоятельных квантовохимических исследований в области молекулярных структур и твердых тел.
--	--	--	--	--

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час — 3/108

Форма промежуточной аттестации – зачет с оценкой.

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость			
		Всего	По семестрам		
			№ семестра	№ семестра 5	...
Контактная работа					
в том числе:	лекции	36		36	
	практические	54		54	
	лабораторные				
	курсовая работа				
Самостоятельная работа		18		18	
Промежуточная аттестация					
Итого:		108		108	

13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК
1. Лекции			
1.1	Основы квантовой механики	Волновая функция многочастичной системы. Энергетический спектр. Энергетическая плотность.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11592
1.2	Статистическая физика	Термодинамические потенциалы. Эргодические системы. Классическое распределение Гиббса. Квантовое распределение Гиббса. Распределение Ферми. Классическая и квантовая теории теплоемкости.	
2. Практические занятия			
2.1	Основы квантовой механики	Волновая функция многочастичной системы. Энергетический спектр. Энергетическая плотность.	
2.2	Статистическая физика	Термодинамические потенциалы. Эргодические системы. Классическое распределение Гиббса. Квантовое распределение Гиббса. Распределение Ферми. Классическая и квантовая теории теплоемкости.	

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Основы квантовой механики	12	20		9	41
2	Термодинамические потенциалы. Эргодические системы. Классическое распределение Гиббса. Квантовое распределение Гиббса. Распределение Ферми. Классическая и квантовая теории теплоемкости. Кинетические уравнения.	24	34		9	67
	Итого:	36	54		18	108

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Организация изучения дисциплины предполагает:

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
- текущий контроль успеваемости в форме устного опроса по основным разделам дисциплины.

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

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В.И. Барановский . – М. : Академия, 2008 .– 382 с.
2	Мултановский В.В. Квантовая механика / В.В. Мултановский, А.С. Василевский. – 2-е изд., перераб. – М. : Дрофа, 2007. – 399 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	Симкин Б.Я. Задачи по теории строения молекул : учебное пособие для студ. вузов / Б.Я. Симкин, М.Е. Клецкий, М.Н. Глуховцев .— Ростов н/Д : Феникс, 1997 .— 270 с.
4	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.
5	Грибов Л.А. Квантовая химия : Учеб. для студ. хим. и биолог. спец. вузов .— М. : Гардарики, 1999 .— 389 с.
6	Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия : Учебник для студ. хим. фак. ун-тов / Н.Ф. Степанов .— М. : Мир, 2001 .— 518 с.

в) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:

№ п/п	Источник
7	Образовательный сайт "Физическая химия ОН-ЛАЙН" http://kozaderov.professorjournal.ru
8	Интернет портал образовательных ресурсов http://window.edu.ru

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник

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

Проведение текущей аттестации и самостоятельной работы по отдельным разделам дисциплины.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

мультимедийный проектор BENQ, экран, ноутбук.

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

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	Основы квантовой механики	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-3.3	Устный опрос
2	Термодинамические потенциалы. Эргодические системы. Классическое распределение Гиббса. Квантовое распределение Гиббса. Распределение Ферми. Классическая и квантовая теории теплоемкости. Кинетические уравнения.	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-3.3	Устный опрос
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет с оценкой				Комплект КИМ

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

Для оценивания результатов обучения на экзамене используются следующие показатели (ЗУНы из 19.1):

- 1) знание электронного строения элементов таблицы Менделеева;
- 2) знание методов исследований строения молекул;
- 3) знание методов компьютерных вычислений электронной структуры молекул
- 4) умение использовать знания для исследования электронных характеристик и свойств широкого круга объектов;

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Теоретические вопросы

1. Основопологающие экспериментальные результаты в построении квантовой механики.
2. Линейные операторы квантовой механики. Эрмитовы операторы. Собственные функции и собственные значения.

3. Разложение функции по собственным функциям оператора.
4. Средние значения физических характеристик.
5. Стационарные состояния.
6. Уравнение непрерывности в сплошной среде.
7. Потоки в квантовой механике.
8. Свойства одномерного движения.
9. Одномерный потенциальный ящик. Четные и нечетные состояния.
10. Трехмерный потенциальный ящик. Вырожденные состояния.
11. Потенциальная ступенька.
12. Потенциальный барьер.
14. Распад волнового пакета со временем.
15. Квантовый гармонический осциллятор.
16. Оператор момента импульса. Коммутационные свойства.
17. Собственные функции и собственные значения оператора момента импульса.
18. Условия возникновения связанного состояния электрона в одномерной и трехмерной потенциальной яме.
19. Волновая функция электрона в периодическом поле. Энергетические зоны. Волны Блоха. Квазиимпульс.
20. Электрон в кулоновском поле. Энергетический спектр.
29. Волновые функции электрона в кулоновском поле.
30. Спин электрона. опыты Штерна-Герлаха, Энтштейна-Де-Гааза.
31. Спиновые волновые функции.
32. Спин-орбитальное взаимодействие.
33. Сложение моментов импульса. Оператор и волновые функции полного момента импульса.
34. Теория возмущений в отсутствие вырождения.
35. Теория возмущений при наличии вырождения. Снятие вырождения.
36. Нестационарная теория возмущений.
37. Квантовые переходы по действиям периодического возмущения.
38. Модель ковалентной химической связи на основе двух-ямного потенциала.
39. Движение электрона в магнитном поле. Уравнение Паули.
40. Поток электронов в магнитном поле.

Перечень практических заданий

1. Расчет электронной структуры атомов по программе GASSIAN
2. Расчет электронной структуры простых молекул по программе GASSIAN

Описание технологии проведения.

После получения студентом билета КИМ и бланка листа ответа, самостоятельно выполняются задания КИМ в письменной форме. Время подготовки 40 минут.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания.

Оценка “отлично” ставится если студент дает полный и правильный ответ, раскрывая теоретические и практические аспекты вопроса, анализируя литературные источники по данному вопросу, аргументирует собственную позицию по данному вопросу

Оценка “хорошо” ставится если студент допускает несущественные ошибки, испытывает трудности при определении собственной оценочной позиции

Оценка “удовлетворительно” ставится если студент допускает существенные ошибки, нарушена логика изложения материала, требуются наводящие вопросы преподавателя

Оценка “неудовлетворительно” ставится при незнании или непонимании большей или наиболее существенной части содержания учебного материала

20.3 Фонд оценочных средств сформированности компетенций студентов, рекомендуемый для проведения диагностических работ

Перечень заданий для оценки сформированности компетенции:

1) открытые задания (средний уровень сложности):

1. Дан оператор $\hat{A} = \frac{d}{dx}$. Найдите $\varphi(x) = \hat{A}^2 \sin x$. (Ответ: $\varphi(x) = -\sin x$.)
2. Найдите $\hat{A}^2 f(x)$, если $\hat{A} = x \frac{d}{dx}$, а $f(x) = \cos x$. (Ответ: $\hat{A}^2 f(x) = -(x \cos x + \sin x)$.)
3. Какие из приведённых пар операторов коммутируют:
а) x и y ; б) $\partial/\partial x$ и $\partial/\partial y$; в) x и $\partial/\partial y$;
г) x и $\partial/\partial x$; д) x и $\partial^2/\partial x^2$? (Ответ: а) да; б) да; в) да; г) нет; д) нет.)
4. Линейны ли операторы: а) извлечения корня б) возведения в квадрат в) дифференцирования г) двукратного дифференцирования д) интегрирования (Ответ: а) нет; б) нет; в) да; г) да; д) да)
5. Операторы и — самосопряжённые. Будет ли оператор самосопряжённым? (Ответ: да)
6. Найдите собственное значение оператора $\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2}$, принадлежащее собственной функции $f(x) = \sin(2x)$. (Ответ: $A = 4$)
7. Найдите собственное значение оператора $\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2$, принадлежащее собственной функции $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$. (Ответ: $A = 1$)
8. Найдите коммутаторы операторов:
а) $[\hat{x}, \hat{P}_y]$; б) $[\hat{x}, \hat{P}_x]$; в) $[\hat{P}_x, \hat{P}_y]$.
Ответ: а) $[\hat{x}, \hat{P}_y] = 0$; б) $[\hat{x}, \hat{P}_x] = i\hbar$; в) $[\hat{P}_x, \hat{P}_y] = 0$.
9. Найдите коммутаторы операторов:
а) $[\hat{x}, \hat{L}_x]$; б) $[\hat{y}, \hat{L}_x]$.
Ответ: а) $[\hat{x}, \hat{L}_x] = 0$; б) $[\hat{y}, \hat{L}_x] = -i\hbar z$.
10. На основе выражения $\hat{L}_x = y\hat{P}_z - z\hat{P}_y$ найдите коммутаторы операторов:
а) $[\hat{P}_x, \hat{L}_x]$; б) $[\hat{P}_y, \hat{L}_x]$.
Ответ: а) $[\hat{P}_x, \hat{L}_x] = 0$; б) $[\hat{P}_y, \hat{L}_x] = -i\hbar \hat{P}_z$.
11. Найдите собственные функции и собственные значения Тх оператора Указание. Введите обозначение и учтите, что дифференциальное уравнение вида имеет общее решение где А и В — произвольные постоянные. Ответ:
 $f_{T_x}(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$, где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, E — любое положительное число
12. Стационарное состояние частицы описывается волновой функцией вида $\Psi(x) = C e^{-\alpha x}$, где C — некоторая постоянная, а $0 \leq x \leq \infty$. Какому условию должен удовлетворять вещественный параметр α , чтобы $\Psi(x)$ удовлетворяла стандартным условиям? Изменится ли ответ, если движение частицы будет происходить на отрицательной полуоси x ? Ответ: $\alpha > 0$. Во втором случае $\alpha < 0$

13. Волновая функция Ψ , описывающая состояние микросистемы, может быть разложена по собственным функциям

$$\Psi = \frac{\sqrt{3}}{2} f_2 + \frac{1}{2} f_5 + \frac{\sqrt{2}}{2} f_6.$$

оператора следующим образом:

Какие значения соответствующей динамической переменной A могут появиться при её измерении и с какими

вероятностями? Ответ: $P(A = A_2) = \frac{1}{2}$; $P(A = A_5) = \frac{1}{6}$; $P(A = A_6) = \frac{1}{3}$. Остальные P равны нулю.

14. Волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 являются решениями стационарного уравнения Шрёдингера $\hat{H}\Psi = E\Psi$ для

собственных значений E_1 и E_2 . Будет ли суперпозиция $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ решением этого уравнения? Ответ: нет

Критерии и шкалы оценивания заданий ФОС:

Для оценивания выполнения заданий используется балльная шкала:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

- 1 балл – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ (полностью или частично неверный).

2) открытые задания (тестовые, повышенный уровень сложности):

- 2 балла – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ (полностью или частично неверный).

3) открытые задания (мини-кейсы, средний уровень сложности):

- 5 баллов – задание выполнено верно (получен правильный ответ, обоснован (аргументирован) ход выполнения (при необходимости));
- 2 балла – выполнение задания содержит незначительные ошибки, но приведен правильный ход рассуждений, или получен верный ответ, но отсутствует обоснование хода его выполнения (если оно было необходимым), или задание выполнено не полностью, но получены промежуточные (частичные) результаты, отражающие правильность хода выполнения задания, или, в случае если задание состоит из нескольких подзаданий, верно выполнено 50% таких подзаданий;
- 0 баллов – задание не выполнено или выполнено неверно (получен неправильный ответ, ход выполнения ошибочен или содержит грубые ошибки).

Задания раздела 20.3 рекомендуются к использованию при проведении диагностических работ с целью оценки остаточных результатов освоения данной дисциплины (знаний, умений, навыков).