

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.22 Квантовая механика и квантовая химия

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

04.03.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализация: Теоретическая и экспериментальная химия.
Прикладная химия.

3. Квалификация выпускника: Бакалавр

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 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 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 применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники.	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: 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 при решении задач химической направленности	
ОПК-4	Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических	ОПК-4.1	Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности	Знать: Квантово-механические аналоги классических химических понятий (химической связи, кратности связи, полярности связи и др.). 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, интерпретировать полученные результаты
		ОПК-4.2	Обрабатывает данные с использованием стандартных способов	

	навыков решения математических и физических задач		аппроксимации численных характеристик	Владеть: навыками в выборе необходимых положений квантовой механики и методов квантовой химии для решения поставленных химических и физико-химических задач
		ОПК-4.3	Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	

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	...
Контактная работа	72	72		
в том числе:	лекции	36	36	
	практические			
	лабораторные	36	36	
	курсовая работа			
Самостоятельная работа	36	36		
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 *
1. Лекции			
1.1	Физические основы квантовой механики.	Квантовая механика – выдающееся открытие XX века. Экспериментальные основы квантовой механики. Элементарная квантовая теория света Эйнштейна. Волново-корпускулярный дуализм – основополагающая идея квантовой механики. Волна де Бройля. Статистическое толкование волн де Бройля. Основные постулаты квантовой механики: о состоянии в квантовой механике; о волновой функции; принцип суперпозиции состояний; уравнение Шредингера. Трактовка причинности в квантовых системах.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия (бакалавры)» » https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.2	Математические основы квантовой механики Шредингера.	Квантово-механический оператор – квантовый аналог классической динамической переменной (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 измерения в микромире. 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. Стационарные состояния и уравнение Шредингера для стационарных состояний.	
1.3	Простейшие применения аппарата квантовой механики.	Одномерное свободное движение. Волна де Бройля. Движение микрочастицы в поле кусочно-постоянных потенциалов. Прохождение частиц через прямоугольный потенциальный барьер. Туннельный эффект. Особенности движения при наличии потенциальной стенки и потенциальной ямы. Движение микрочастицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими вертикальными стенками. Движение в трехмерном потенциальном «ящике». Вырожденные энергетические состояния микрочастицы при движении в «ящике». Квантовая теория гармонического осциллятора.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия (бакалавры)» » https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
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 орбитального момента импульса электрона.	
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 частиц. Волновая функция системы тождественных бозонов и системы тождественных фермионов.	
1.7	Приближенные методы квантовой механики. Одноэлектронная модель	Квантовая химия как результат приложения законов квантовой механики к химическим частицам. 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 молекулярных орбиталей (МО). Приближение ЛКАО. Выбор базисных функций для расчета. Уравнения Хартри-Фока на конечном	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия

		<p>базисе: метод ССП МО ЛКАО (Рутан). Пределы применимости метода. Энергия корреляции</p> <p>Принципы упрощения вычислительной процедуры в методе МО. Валентное приближение. π-Электронное приближение. Приближение нулевого дифференциального перекрытия (НДП). Понятие о полуэмпирических методах ССП МО ЛКАО и полуэмпирических несамосогласованных методах МО ЛКАО. Расширенный метод Хюккеля (PMX) и простой метод Хюккеля (MOX). Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии. Теорема Гельмана-Фейнмана и критерий прочности химической связи.</p> <p>Понятие о квантово-химическом моделировании и его возможностях. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.</p>	<p>(бакалавры)</p> <p>»</p> <p>https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931</p>
2. Лабораторные занятия			
2.1	Физические основы квантовой механики	Решение задач по теме (длина волны де Бройля для электрона и макроскопических тел, фотоэффект, уравнения Бора для движения электрона в атоме водорода).	<p>ЭУМК</p> <p>«Квантовая механика и квантовая химия (бакалавры)»</p> <p>https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931</p>
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 поле кусочно-постоянных и параболических потенциалов.	Рассмотрение решения уравнения Шредингера и получение физической информации, относящейся к туннельному эффекту и гармоническому осциллятору (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 об одноэлектронном приближении.	
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	Рассмотрение расчета простой молекулы методом Рутана. Рассмотрение расчета органической	

	квантовой химии	молекулы (C ₂ H ₄ , CH ₂ 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.	3		2	6	11
2	Математические основы квантовой механики Шредингера.	7		8	15	30
3	Простейшие применения аппарата квантовой механики.	6		6	11	23
4	Статистическое толкование квантовой механики	2		–	2	4
5	Движение в центральном поле. Атом водорода.	5		6	12	23
6	Спин элементарных частиц. Тожественность частиц.	3		–	5	8
7	Приближенные методы квантовой механики. Одноэлектронная модель.	5		6	11	22
8	Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	5		8	10	23
	Итого:	36		36	72	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. 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 www.lib.vsu.ru
7	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия (бакалавры)» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931

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. 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.	Физические основы квантовой механики	ОПК-3	ОПК-3.1	Решение задач (аудиторное задание)
2.	Математические основы квантовой механики Шредингера.	ОПК-3 ОПК-4	ОПК-3.2 ОПК-4.1	Решение задач (аудиторное задание)
3.	Простейшие	ОПК-3	ОПК-3.1	Контрольная работа

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
	применения аппарата квантовой механики.	ОПК-4	ОПК-4.1 ОПК-4.2	
4.	Статистическое толкование квантовой механики	ОПК-4	ОПК-4.3	Практико-ориентированное домашнее задание
5.	Движение в центральном поле. Атом водорода	ОПК-3 ОПК-4	ОПК-3.1 ОПК-4.1	Решение задач (аудиторное задание)
6.	Спин элементарных частиц. Тождественность частиц.	ОПК-3	ОПК-3.1	Практико-ориентированное домашнее задание
7.	Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	ОПК-3 ОПК-4	ОПК-3.2 ОПК-4.2 ОПК-4-3	Практическое задание
Промежуточная аттестация форма контроля - экзамен				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 заданий для лабораторных работ

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 гироманнитного 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 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.

19.1.4. Пример задания для контрольной работы

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 \mathbf{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?

19.1.5. Примеры практико-ориентированных домашних заданий

1. Написать реферат на тему «Проблема производной динамической переменной по времени».
2. Написать реферат на тему «Уравнения Эренфеста и связь классической и квантовой механики»

3. Написать реферат на тему «Квантовые интегралы движения и принципы динамической симметрии».
4. Вычислить длину волны де Бройля для макроскопического тела, движущегося свободно с заданной скоростью. То же задание для электрона в кинескопе, ускоренного разностью потенциалов в 5 ...20 кВ.
5. Вычислить «красную границу» фотоэффекта для указанного преподавателем металла (необходимые для вычисления данные обучающийся находит самостоятельно в справочной литературе).
6. На основе квантово-механических законов вычислить характер изменения плотности вероятности обнаружения макроскопического тела, движущегося в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими вертикальными стенками. Сделать тот же расчет на основе классических представлений и сравнить результаты.
7. На основании решения задачи о линейном гармоническом осцилляторе оценить теплоемкость одноатомного кристалла при высоких температурах. Параметры осциллятора можно найти в справочной литературе или взять несколько разных значений в достаточно широком интервале значений.
8. Написать реферат на тему «Представление операторов в матричной форме. Операторы спина электрона».
9. Написать реферат на тему «Опыт Эйнштейна – де Гааза и интерпретация его результатов на основе современной квантовой механики».
10. Сопоставить выводы «старой квантовой механики» (атом водорода по Н.Бору, 1913) с расчетами атома водорода методами современной квантовой механики.

19.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

19.2.1. Перечень вопросов к экзамену

1. Элементарная квантовая теория света Эйнштейна. Волново-корпускулярный дуализм для света.
2. Волна де Бройля. Физическое толкование волны де Бройля.
3. Понятие состояния в квантовой механике.
4. Понятие волновой функции. Свойства волновой функции.
5. Уравнение Шредингера как постулат квантовой механики. Основные свойства уравнения.
6. Принцип суперпозиции состояний.
7. Понятие оператора. Линейные самосопряженные операторы.
8. Алгебра операторов (определение основных понятий).
9. Собственные функции и собственные значения операторов (определение понятий). Значение для квантовой механики.
10. Теорема о собственных значениях самосопряженных операторов.
11. Теорема о собственных функциях самосопряженного оператора.
12. Теорема о полноте собственных функций оператора.
13. Теоремы о собственных функциях коммутирующих операторов.
14. Средние значения динамических переменных. Постулат о среднем.
15. Вероятность определенного значения динамической переменной в измерении.
16. Условие, при котором несколько динамических переменных могут быть измерены одновременно. Понятие полного набора физических величин.
17. Соотношение неопределенностей. Принцип неопределенности Гейзенберга.
18. Операторы динамических переменных $x, f(x), p_x, p_y, p_z, p, T$. Принцип соответствия.
19. Операторы динамических переменных M_x, M_y, M_z, M, M^2 . Принцип соответствия.
20. Функция Гамильтона. Оператор Гамильтона. Оператор полной энергии.
21. Понятие стационарного состояния. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.

22. Уравнение Шредингера и закон сохранения числа частиц. Вектор плотности потока вероятности.
23. Одномерное свободное движение. Волна де Бройля.
24. Движение частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими вертикальными стенками.
25. Движение частицы в трехмерном потенциальном «ящике».
26. Прохождение частицы через прямоугольный потенциальный барьер. Туннельный эффект.
27. Элементарная квантовая теория гармонического осциллятора.
28. Общая характеристика движения в центральном поле.
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. π -Электронное приближение. Простой метод Хюккеля (метод МОХ) и его возможности.
49. Гибридизация атомных орбиталей в методе МО.
50. Теорема Гельмана-Фейнмана критерий прочности химической связи.

19.2.2. Комплект КИМ

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия
Дисциплина Квантовая механика и 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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

Контрольно измерительный материал № 4

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

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия
Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия
Форма обучения очная
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия
Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия
Форма обучения очная
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия
Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия
Форма обучения очная
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточный

Контрольно измерительный материал № 10

1. Операторы динамических переменных M_x , M_y , M_z , M , M^2 . 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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия
Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия
Форма обучения очная
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия
Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия
Форма обучения очная
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия
Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия
Форма обучения очная
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

Контрольно измерительный материал № 18

1. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении. Детерминант Слэтера.
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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

Контрольно измерительный материал № 19

1. Волновая функция системы частиц. Принцип тождественности частиц.
2. Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии. Валентное приближение.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., доц. _____ О.А. Козадеров
_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия
Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия
Форма обучения очная
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточный

Контрольно измерительный материал № 20

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., доц. _____ О.А. Козадеров
_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия
Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия
Форма обучения очная
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточный

Контрольно измерительный материал № 21

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., доц. _____ О.А. Козадеров
_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия
Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия
Форма обучения очная
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточный

Контрольно измерительный материал № 22

1. Теорема о полноте собственных функций оператора.
2. Действительные орбитали атома водорода.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

Контрольно измерительный материал № 23

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., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

Контрольно измерительный материал № 24

1. Элементарная квантовая теория света Эйнштейна. Волна де Бройля. Физическое толкование волны де Бройля.
2. Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии. π -Электронное приближение. Простой метод Хюккеля (метод МОХ) и его возможности.

Преподаватель

Кондрашин В.Ю.

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий кафедрой физической химии

д.х.н., доц. _____ О.А. Козадеров

_____. _____. 2020

Направление подготовки / специальность 04.03.01 Химия

Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточный

Контрольно измерительный материал № 25

1. Понятие состояния в квантовой механике
2. Гибридизация атомных орбиталей в методе МО. Теорема Гельмана-Фейнмана и критерий прочности химической связи.

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.