


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

17.04.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.О.18 Квантовая физика и квантовая химия

- 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 №4 от 11.04.2024

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2027-2028

Семестр(ы): 7

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Цели дисциплины: раскрыть принципы квантовохимического описания строения химических частиц (атомов, молекул, полимеров); научить интерпретировать результаты квантовохимических расчетов химических частиц.

В задачи курса входит: познакомить студентов с экспериментальными основами квантовой химии; изучить приближенные методы квантовой химии; познакомить с решением простейших квантовохимических задач и с расчетами простых молекул; определить квантовохимические аналоги основных понятий классической теории химического строения.

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 — 4/144

Форма промежуточной аттестации – экзамен.

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость			
		Всего	По семестрам		
			№ семестра	№ семестра 7	...
Контактная работа					
в том числе:	лекции	34		34	
	практические	50		50	
	лабораторные				
	курсовая работа				
Самостоятельная работа		24		24	
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	Многоэлектронные атомы	Вариационный принцип. Решение уравнения Шредингера. Метод самосогласованного поля. Атомные орбитали и их характеристики. Детерминант Слэтера. Метод Хартри-Фока.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11232
1.2	Молекулы	Приближение Борна-Оппенгеймера. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана. Неэмпирическая квантовая химия. Базисные функции для неэмпирических расчетов. Минимальный и расширенный атомные базисные наборы. Методы квантовой химии, основанные на частичном и полном пренебрежении дифференциальным перекрытием. π -электронное приближение. Простой и расширенный методы Хюккеля. Метод Парризера-Парра-Попла. Колебательные и вращательные спектры молекул.	
1.3	Химическая связь	Симметрия молекул. Молекулярные орбитали и их симметричная классификация. Электронные конфигурации двухатомных молекул.	

		Пространственное распределение электронной плотности. Теорема Гельмана-Фейнмана. Теорема вириала. Электронное строение многоатомных молекул. Локализация и гибридизация орбиталей. Модель отталкивания электронных пар. Химическая связь в координационных соединениях. Теория кристаллического поля. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Теория поля лигандов.	
1.4	Электронные состояния твердых тел	Одноэлектронные волновые функции в кристаллах. Зонная структура твердых тел. Электронное строение кристаллических и аморфных тел.	
1.5	Химические реакции	Реакционная способность молекул. Поверхность потенциальной энергии молекул. Поверхность потенциальной энергии для взаимодействующих частиц. Динамика элементарного акта. Правило Вудворда-Хоффмана. Переходное состояние. Индексы реакционной способности молекул.	
2. Практические занятия			
2.1	Многоэлектронные атомы	Атомные термы различных атомов, основное и возбужденные состояния, вырождение состояний в электрическом и магнитном полях	-
2.2	Молекулы	Энергия электронов в двухатомных молекулах, строение многоатомных молекул. Расчет волновых функций и характеристик молекул.	-
2.3	Химическая связь	Построение гибридных молекулярных орбиталей в молекулах, нахождение симметрий молекул разного состава	
2.4	Электронные состояния твердых тел	Электронное строение металлов, диэлектриков и полупроводников. Модель свободных электронов, метод сильной связи.	
2.5	Химические реакции	Расчет энергетических барьеров химических реакций	

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				Всего
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	
1	Многоэлектронные атомы	8	10	0	4	22
2	Молекулы	8	10	0	6	24
3	Химическая связь	8	10	0	4	22
4	Электронные состояния твердых тел	8	10	0	6	24
5	Химические реакции	2	10	0	4	16
Итого:		34	50		24	144

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	Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е.В. Бутырская. – М. : СОЛОН-ПРЕСС, 2011. – 218 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. Использование ЭУМК <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11232>

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	Многоэлектронные атомы	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-3.3	Устный опрос
2	Молекулы	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-3.3	Устный опрос
3	Химическая связь	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-3.3	Устный опрос
4	Электронные состояния твердых тел	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-3.3	Устный опрос
5	Химические реакции	ОПК-3	ОПК-3.1	Устный опрос

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
			ОПК-3.2 ОПК-3.3	
Промежуточная аттестация форма контроля – экзамен				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. Решение уравнения Шредингера для электрона в кулоновском поле. Энергетический спектр и волновые функции атома водорода.
2. Спиновые состояния электрона. Спин-орбитальное взаимодействие.
3. Энергетический спектр и волновые функции атома водорода с учетом спин-орбитального взаимодействия.
4. Волновая функция система многих частиц. Оператор перестановки частиц. Фермионы и бозоны. Принцип Паули.
5. Зависимость энергии от спина системы электронов.
6. Электронные конфигурации основных и возбужденных состояний элементов таблицы Менделеева.
7. Волновые функции и термы атомов. Диаграммы Гротриана.
8. Конфигурации из валентных электронов. LS- и JJ-связь.
9. Гибридизация атомных орбиталей.
10. Статистическая модель атома.
11. Вариационный принцип в квантовой механике.
12. Уравнение Хартри-Фока. Самосогласованный потенциал. Теорема Купманса.
13. Адиаботическое приближение в квантовой теории систем многих частиц. Зависимость уровней энергии от положения ядер. Изоэнергетические поверхности.
14. Одночастичное представление волновых функций многоэлектронной системы. Функциональные базисы. Молекулярные орбитали.
15. Метод Хартри-Фока-Рутана.
16. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока.
17. Метод конфигурационного взаимодействия.
18. Теория функционала плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона. Уравнение Кона-Шема.
16. Симметрия и энергетические термы двуатомных молекул.
17. Химическая связь в двухатомных молекулах. Теорема Гельмана-Фейнмана.
18. Группы симметрии и энергетические термы многоатомных молекул.
19. Пространственные конфигурации молекул и ионов, теория Гиллеспи.

-
20. Химическая связь в координационных соединениях. Теория кристаллического поля.
 21. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Теория поля лигандов.
 22. Кластерное приближение и его применение в квантовой химии координационных соединений.
 23. Эффект Яна-Теллера в молекулах и молекулярных комплексах.
 24. Одноэлектронные волновые функции в кристаллах. Волны Блоха. Зонная структура кристаллов. Уровень Ферми. Плотность состояний.
 25. Волновые функции металлов и диэлектриков. Модели свободных и сильно связанных валентных электронов.
 26. Электронная структура молекулярных кристаллов.
 27. Электронная структура аморфных материалов.
 28. Электронная структура магнитных материалов.
 29. Квантово-химическое описание химических реакций в газовой фазе. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ) химической реакции. Путь химической реакции, координата реакции. Переходное состояние или активированный комплекс.
 29. Расчет реагентов, продуктов, перед- и послереакционных комплексов.
 30. Орбитальные модели взаимодействия молекул с поверхностью. Хемосорбция.
 31. Химические реакции в твердых телах. Роль дефектов структуры.

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

ОПК-3 _Способен использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области математических и смежных естественных наук

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 $\Psi(x) = Ce^{-\alpha x}$, 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

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

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).