

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

**УТВЕРЖДАЮ**

Заведующий кафедрой  
физической химии

А.В. Введенский

31.08.2017 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Б1.В.ОД.8 Квантовая механика и квантовая химия**

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:**  
04.03.01 Химия
- 2. Профиль подготовки/специализация:** Органическая и полимерная химия.  
Теоретическая и экспериментальная химия
- 3. Квалификация (степень) 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 26.06.2017

---

отметки о продлении

**8. Учебный год:** 2019 / 2020

**Семестр:** 5

## 9. Цели и задачи учебной дисциплины:

**Цель:** Познакомить студентов 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:** Познакомить студентов 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: Вариативная часть Блока 1. Обязательная дисциплина.

Наиболее важные предшествующие дисциплины: Математика, Физика, Неорганическая химия. Для изучения данной дисциплины студент должен знать декартову и сферическую системы координат; уметь дифференцировать и интегрировать элементарные функции; знать специальные интегралы; знать основы классической механики, молекулярной физики, теории электричества, оптики, атомной и ядерной физики; иметь представления о строении ряда молекул неорганической и органической химии.

## 11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-1	Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	<p>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.</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</p>

		<p>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 — 3/108.**

**Форма промежуточной аттестации: Экзамен.**

### 13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		5 семестр	№ семестра	...
Аудиторные занятия	54	54		
в том числе: лекции	18	18		
практические	—	—		
лабораторные	36	36		
Самостоятельная работа	18	18		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час. / экзамен – ___ час.)	36	36		
Итого:	108	108		

### 13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
<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.
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. 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.
1.3	Простейшие применения аппарата квантовой механики.	Одномерное свободное движение. Движение в поле кусочно-постоянных потенциалов. Прохождение частиц через прямоугольный потенциальный барьер. Туннельный эффект. Особенности движения при наличии

		потенциальной стенки и потенциальной ямы. Движение в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими вертикальными стенками. Движение в потенциальном «ящике». Квантовая теория гармонического осциллятора. Квантовая теория жесткого ротатора.
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.
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 несамосогласованных методах МО ЛКАО. Расширенный метод Хюккеля (PMX) и простой метод Хюккеля (MOX). Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии. Понятие о квантово-химическом моделировании и его возможностях. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.
<b>2. Лабораторные работы</b>		
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.	Ознакомление с операторами основных динамических переменных. Практическое определение коммутационных

	Сферическая система координат.	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 ( $C_2H_4$ , $CH_2O$ ) расширенным методом Хюккеля или ПДП/2. Проблема возможности построения классической формулы (графические работы).

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

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Физические основы квантовой механики.	2		2	4	8
2	Математические основы квантовой механики Шредингера.	4		6	10	20
3	Простейшие применения аппарата квантовой механики.	4		6	10	20
4	Статистическое толкование квантовой механики	1		–	2	3
5	Движение в центральном поле. Атом водорода	3		6	8	17
6	Спин элементарных частиц. Тожественность частиц.	2		–	4	6
7	Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	2		18	14	34
	Итого:	18		38	52	108

#### 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.moodle.vsu.ru](http://www.moodle.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	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.

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>

\* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договора у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы

#### 16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ 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.
2	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.
3	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. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости).**

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

Хорошая доска в аудитории. Таблицы производных и интегралов. Таблицы специальных интегралов. Программируемый научный калькулятор.

---

**19. Фонд оценочных средств:**

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

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС* (средства оценивания)
ОПК-1 Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	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.	1. Математические основы квантовой механики Шредингера. 2. Приближенные методы квантовой механики. Одноэлектронная модель. 3. Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	Практическое задание
	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.	1. Математические основы квантовой механики Шредингера. 2. Простейшие применения аппарата квантовой механики. 3. Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	Контрольная работа

	Иметь навыки практического использования законов квантовой механики и результатов квантово-химических расчетов молекул для предсказания макроскопических свойств химических веществ.	1. Простейшие применения аппарата квантовой механики. 2. Движение в центральном поле. Атом водорода. 3. Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	Практическое задание
ПК-1 Владение системой фундаментальных химических понятий	Знать: Квантово-механические аналоги классических химических понятий (химической связи, кратности связи, полярности связи и др.).	Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	Практическое задание
	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.	Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	Практическое задание
	Иметь навыки в выборе необходимых положений квантовой механики и методов квантовой химии для решения поставленных химических и физико-химических задач:	1. Простейшие применения аппарата квантовой механики. 2. Движение в центральном поле. Атом водорода. 3. Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля.	Практическое задание
<b>Промежуточная аттестация (экзамен)</b>			<b>КИМ</b>

## 19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Для оценивания результатов обучения на экзамене используются следующие показатели:

1. Владение понятийным аппаратом квантовой механики и квантовой химии; владение теоретическими основами данной дисциплины; умение мыслить в терминах квантовой

науки; способность иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.

2. Умение использовать математический аппарат квантовой механики и квантовой химии для решения практических задач.

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

### 19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

#### 19.3.1 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.  $\pi$ -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.

### 19.3.2 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 гиромангнитного 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.

#### **19.3.4 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.

#### **19.4. 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 одна контрольная работа). Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.