

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
материаловедения и индустрии наносистем



В.М. Иевлев
20.06.2018г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.03. Основы квантовой механики

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:**
04.03.02 Химия, физика и механика материалов
- 2. Профиль подготовки/специализация:**

- 3. Квалификация (степень) выпускника:** бакалавр
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** Материаловедения и индустрии наносистем
- 6. Составители программы:** Даринский Борис Михайлович, доктор физико-математических наук профессор
- 7. Рекомендована:** Научно-методическим советом химического факультета, протокол №5 от 24.05.2018
- 8. Учебный год:** 2020-2021 **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, вариативная часть

Необходимо знание уравнений математической физики и методов решения этих уравнений, основных понятий теории вероятностей, законов классической механики и электродинамики.

Физика твердого тела, физико-химия конденсированного состояния вещества.

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 современные методы химии, физики, математики механики, биологии на уровне, необходимом для приобретения новых знаний с их использованием и решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций и имеющих естественнонаучное содержание.	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-2	способностью использовать практические навыки экспериментальной работы в областях неорганической, аналитической, органической и физической химии; химии и физики высокомолекулярных соединений; структурной химии и кристаллохимии; общей физики; физики конденсированного состояния	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-4	способностью использования феноменологических, математических и численных (альтернативных) моделей для описания и прогнозирования различных явлений, осуществление их	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.

	качественного и количественного анализа	Владеть: навыками проведения самостоятельных квантовохимических исследований в области молекулярных структур и твердых тел.
ПК-1	способностью использовать основные современные методологические, теоретические и экспериментальные подходы к проведению научных исследований по выбранному профилю программы	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 проведения самостоятельных исследований в области теоретических расчетов молекулярных и твердотельных систем

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 5/180.

Форма промежуточной аттестации – экзамен.

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		5	№ семестра	...
Аудиторные занятия	68	68		
в том числе: лекции	34	34		
практические	34	34		
лабораторные				
Самостоятельная работа	76	76		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час./ экзамен – 36 час.)	Экзамен 36			
Итого:	180	180		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	Основы квантовой механики	Волновая функция многочастичной системы. Энергетический спектр. Энергетическая плотность.
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	10	10		26	46
2	Термодинамические	24	24		50	98

	потенциалы. Эргодические системы. Классическое распределение Гиббса. Квантовое распределение Гиббса. Распределение Ферми. Классическая и квантовая теории теплоемкости. Кинетические уравнения.					
	Итого:	34	34	0	76	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

Организация изучения дисциплины предполагает:

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
- текущий контроль успеваемости в форме устного опроса по основным разделам дисциплины.
- ЭУМК <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11592>

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

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

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

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	
2	

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

- ЭУМК <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11592>

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Персональные компьютеры с доступом в Интернет; мультимедийный проектор BENQ, экран, ноутбук.

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 современные методы химии, физики, математики механики, биологии на уровне, необходимом для приобретения новых знаний с их использованием и решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций и имеющих естественнонаучное содержание.	знать методы описания электронной структуры атомов, основные закономерности изменения характеристик атомов в таблице Менделеева, квантовые модели электронной структуры .	Раздел 1	Устный опрос
	уметь: использовать знания для построения моделей, проведения компьютерных расчетов и интерпретации полученных результатов молекул, нанокластеров и кристаллических твердых тел.	Все разделы	Практическое задание № 1,2
	владеть: навыками интерпретации экспериментальных результатов на основе представлений об электронном строении объекта.	Все разделы	Практическое задание № 1,2
ОПК-2 способностью использовать практические навыки экспериментальной работы в областях неорганической, аналитической, органической и физической химии; химии и физики высокомолекулярных соединений; структурной химии и кристаллохимии; общей физики; физики конденсированного состояния	знать: методы квантового расчета и интерпретации результатов для молекул и твердых тел.	Все разделы	Устный опрос
	уметь: использовать знания для построения моделей, проведения компьютерных расчетов и интерпретации полученных результатов молекул, нанокластеров и кристаллических твердых тел.	Все разделы	Практическое задание № 1,2
	владеть: навыками интерпретации экспериментальных результатов на основе представлений об электронном строении объекта.	Все разделы	Практическое задание № 1,2

ОПК-4 способностью использования феноменологических, математических и численных	знать: Классификацию различных методов компьютерных расчетов молекул и твердых тел, методики проведения расчетов, интерпретацию полученных результатов.	Все разделы	Устный опрос
	уметь: использовать знания для адекватной постановки задач, проведения расчетов, интерпретации результатов.	Все разделы	Практич еское задание № 1,2
	владеть: навыками проведения самостоятельных квантовохимических исследований в области молекулярных структур и твердых тел.	Все разделы	Практич еское задание № 1,2
ПК-1 способностью использовать основные современные методологические, теоретические и экспериментальные подходы к проведению научных исследований по выбранному профилю программы	знать: методы квантового расчета и интерпретации результатов для молекул и твердых тел.	Все разделы	Устный опрос
	Уметь: использовать знания для построения моделей, проведения компьютерных расчетов и интерпретации полученных результатов молекул, нанокластеров и кристаллических твердых тел.	Все разделы	Практич еское задание № 1,2
	Владеть: навыками проведения самостоятельных исследований в области теоретических расчетов молекулярных и твердотельных систем	Все разделы	Практич еское задание № 1,2
Промежуточная аттестация		КИМ	

* В графе «ФОС» в обязательном порядке перечисляются оценочные средства текущей и промежуточной аттестаций.

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

Пример:

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;

Для оценивания результатов обучения на экзамене используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

	Уровень	
--	---------	--

Критерии оценивания компетенций	сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом данной области науки, способен иллюстрировать ответ примерами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения в области электронного строения и химической связи.	Повышенный уровень	Отлично
Обучающийся владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), способен использовать знания для интерпретации эффектов в квантовой химии, допускает отдельные ошибки при рассмотрении конкретных способов	Базовый уровень	Хорошо
Обучающийся владеет частично теоретическими основами дисциплины, допускает ошибки в интерпретации эффектов на квантовом уровне.	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки.	–	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. 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.

19.3.2 Перечень практических заданий

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

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 форме устного опроса, защиты рефератов выполнения практического задания. Критерии оценивания приведены выше.

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.

При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.