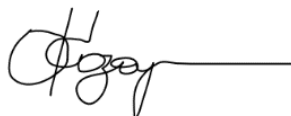


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
физической химии



Козадеров О.А.
10.04.2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.О.19 Квантовая механика и квантовая химия

1. Код и наименование специальности: 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
 2. Специализация: Фундаментальная химия в профессиональном образовании
 3. Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии
 4. Форма обучения: Очная
 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: 1004 физической химии
 6. Составители программы: Нечаев Игорь Владимирович, к.х.н.
 7. Рекомендована: НМС химического факультета от 27.03.2025, протокол № 10-03
 8. Учебный год: 2027/2028
- Семестр(ы): 5**

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целями освоения учебной дисциплины являются:

- познакомить обучающихся с основными принципами и математическим аппаратом квантовой механики Шредингера;
- научить интерпретировать результаты квантово-химических расчетов на примере простых модельных систем;
- раскрыть принципы квантово-химического описания строения химических частиц на примере атома водорода;
- дать представление о возможностях квантово-химического моделирования многоэлектронных систем.

Задачи учебной дисциплины: познакомить обучающихся:

- с математическим аппаратом квантовой механики Шредингера (операторы и операторные уравнения);
- с решением простейших квантово-механических задач;
- с основами метода и математическим аппаратом метода Хартри-Фока;
- с принципами моделирования многоэлектронных систем.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: обязательная часть блока Б1

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-1	Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	ОПК-1.1	Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	Знать: принципы (постулаты) квантовой механики; метод самосогласованного поля и его приложения к задачам квантовой химии; модель водородоподобного атома; принципы моделирования многоэлектронных систем. Уметь: использовать данные об электронном строении отдельных молекул для предсказания макроскопических свойств химических веществ и их реакционной способности. Владеть: способами обработки результатов квантово-механических расчетов
		ОПК-1.2	Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	Знать: квантово-механические аналоги классических химических понятий (химической связи, кратности связи, полярности связи и др.). Уметь: интерпретировать результаты квантово-механических расчетов Владеть навыками: выбора необходимых положений квантовой механики и методов квантовой химии для решения поставленных химических и физико-химических задач

		ОПК-1.3	Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ химической направленности	Знать: базовые законы квантовой механики и квантовой химии. Уметь: получать необходимую квантово-химическую информацию о строении и свойствах химических веществ. Владеть навыками: формулировки выводов на основе поставленных целей и полученных результатов в области квантовой механики и квантовой химии.
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	ОПК-3.1	Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знать: основные теоретические и полуэмпирические модели, используемые при решении квантово-химических задач. Уметь: интерпретировать результаты квантово-механических расчетов движения частиц в заданных силовых полях. Владеть: навыками практического использования законов квантовой механики для моделирования простых модельных систем.
		ОПК-3.2	Использует стандартное программное обеспечение при решении задач профессиональной деятельности	Знать: программное обеспечение для решения квантово-механических задач Уметь: решать несложные квантово-механические задачи; Владеть: базовыми методами решения квантово-механических задач

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 5/180.

Форма промежуточной аттестации экзамен

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость	
		Всего	По семестрам
Аудиторные занятия		108	108
в том числе:	лекции	36	36
	практические	72	72
	лабораторные		
Самостоятельная работа		36	36
в том числе: курсовая работа (проект)			
Форма промежуточной аттестации (экзамен – 36 час.)		36	36
Итого:		180	180

13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК
1. Лекции			
1.1	Экспериментальные	Квантовая механика – выдающееся открытие XX	ЭУМК

	основы квантовой механики	века. Излучение абсолютно чёрного тела. Фотоэффект. Опыт Франка и Герца. Боровская модель атома и спектр атома водорода.	«Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.2	Физические основы квантовой механики	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.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.3	Математические основы квантовой механики Шрёдингера	Квантово-механический оператор – квантовый аналог классической динамической переменной. Алгебра операторов. Собственные функции и собственные значения операторов. Постулат о спектре квантово-механических операторов. Операторы основных динамических переменных. Оператор Гамильтона. Свойства уравнения Шредингера. Средние значения динамических переменных. Постулат о среднем.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.4	Основные положения квантовой механики	Стационарные состояния. Вычисление вероятностей результатов измерения в микромире. Условие, при котором несколько динамических переменных могут быть измерены одновременно. Соотношение неопределенностей Гейзенберга и следствия из него. Понятие о полном наборе динамических переменных.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.5	Частица в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками	Движение микрочастицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими вертикальными стенками. Движение в трехмерном потенциальном «ящике». Вырожденные энергетические состояния микрочастицы при движении в «ящике».	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.6	Гармонический осциллятор	Гармонический осциллятор в квантовой механике. Решение уравнения Шрёдингера для осциллятора. Сравнение квантового и классического осциллятора.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.7	Туннельный эффект	Квантовое описание одномерного движения частицы с преодолением прямоугольного потенциального барьера. Туннельный эффект.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.8	Потенциальная яма конечной глубины	Движение микрочастицы в одномерной потенциальной яме с одной бесконечно высокой	ЭУМК «Квантовая

		стенкой. Потенциальная яма конечной глубины.	механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.9	Движение в центральном поле. Жёсткий ротатор	Общее рассмотрение движения в центральном поле. Полный набор динамических переменных. Теория жесткого ротатора. Волновые функции жёсткого ротатора.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.10	Водородоподобный атом. Часть 1.	Уравнение Шредингера для водородоподобного атома. Радиальные и сферические функции. Квантовые числа n , l и m . Атомные орбитали. Понятие о пространственном квантовании орбитального момента импульса электрона. Энергетический спектр атома водорода. Доплеровское уширение спектральных линий.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.11	Водородоподобный атом. Часть 2.	Функции радиального и углового распределения электронной плотности атома водорода. Действительные орбитали атома водорода.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.12	Спин элементарных частиц	Спин электрона, протона, нейтрона, фотона. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления. Принцип тождественности частиц. Бозоны и фермионы. Оператор спина электрона. Спиновые функции.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.13	Вариационный метод	Проблемы решения уравнения Шрёдингера для коллектива частиц. Теория вариационного метода. Математические основы вариационного метода Ритца. Применение вариационного метода Ритца для простых модельных систем.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.14	Метод Хартри-Фока	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.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.15	Метод молекулярных орбиталей с применением метода	Способы решения проблемы многих тел в квантовой химии. Неэмпирические и полуэмпирические методы. Основные положения	ЭУМК «Квантовая механика и

	самосогласованного поля. Часть 1	метода молекулярных орбиталей (МО). Приближение ЛКАО. Выбор базисных функций для расчета. Уравнения Хартри-Фока на конечном базисе: метод ССП МО ЛКАО (Рутан). Пределы применимости метода. Энергия корреляции. Принципы упрощения вычислительной процедуры в методе МО.	квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
	Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля. Часть 2	Валентное приближение. π -Электронное приближение. Приближение нулевого дифференциального перекрытия (НДП). Понятие о полуэмпирических методах ССП МО ЛКАО и полуэмпирических самосогласованных методах МО ЛКАО. Расширенный метод Хюккеля (РМХ) и простой метод Хюккеля (МОХ). Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии. Теорема Гельмана-Фейнмана и критерий прочности химической связи.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.17	Теория возмущений	Математические основы теории возмущений. Сдвиги энергий стационарных состояний атома водорода, обусловленные зависимостью массы электрона от скорости. Спин-орбитальное взаимодействие.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
1.18	Многоэлектронные атомы	Гамильтониан многоэлектронного атома в адиабатическом приближении. Энергетические уровни многоэлектронных атомов. Правила построения периодической системы Д.И. Менделеева. Квантовые числа многоэлектронных атомов. Термы многоэлектронных атомов.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
2. Практические занятия			
3.1	Алгебра операторов	Понятие оператора. Ознакомление с математическими действиями над операторами. Коммутатор операторов.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.2	Линейные самосопряжённые операторы	Отбор линейных самосопряженных операторов. Решение задач на проверку самосопряженности оператора.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.3	Собственные функции и собственные значения операторов	Решение задач на нахождение собственных функций и собственных значений операторов.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.4	Собственные функции и собственные значения	Решение задач на нахождение собственных функций и собственных значений операторов в	ЭУМК «Квантовая

	операторов в сферической системе координат	сферической системе координат.	механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.5	Волновая функция и её статистический смысл	Ознакомление с понятием волновой функции частицы. Получение простейшей информации из волновой функции. Решение задач на расчёт вероятности нахождения частицы в заданной области пространства. Нормировка волновой функции.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.6	Основные положения квантовой механики. Часть 1	Принцип суперпозиции состояний. Расчёт вероятности получения конкретного результата при измерении квантовой системы по правилу Борна.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.7	Основные положения квантовой механики. Часть 2	Принцип суперпозиции состояний. Расчёт вероятности получения конкретного результата при измерении квантовой системы по правилу Борна.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.8	Точно решаемые задачи в квантовой механике. Часть 1	Рассмотрение решения уравнения Шредингера для простейших задач квантовой механики. Получение физической информации из решения уравнения Шредингера.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.9	Точно решаемые задачи в квантовой механике. Часть 2	Рассмотрение решения уравнения Шредингера для простейших задач квантовой механики. Получение физической информации из решения уравнения Шредингера.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.10	Состояние электрона в водородоподобном атоме	Рассмотрение решения уравнения Шредингера для атома водорода. Получение физической информации из решения уравнения Шредингера	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.11	Функции радиального распределения электронной плотности атома водорода	Построение функций радиального распределения электронной плотности атома водорода (графические работы).	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.12	Функции углового распределения	Построение функций углового распределения электронной плотности атома водорода	ЭУМК «Квантовая

	электронной плотности атома водорода	(графические работы).	механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.13	Построение “фотографий” электронной плотности атома водорода. Действительные орбитали атома водорода	Построение “фотографий” электронной плотности и действительных орбиталей атома водорода (графические работы).	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.14	Вариационный метод. Часть 1	Приближённое решение уравнения Шрёдингера вариационным методом Ритца.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.15	Вариационный метод. Часть 2	Приближённое решение уравнения Шрёдингера вариационным методом Ритца.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.16	Самосогласованное поле	Вариационный принцип в квантовой механике. Уравнения Хартри-Фока, общий метод решения. Точность расчета многоэлектронных систем методом Хартри-Фока.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.17	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).	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3.18	Многоэлектронные атомы	Сложение угловых моментов частиц. Расчёт термов многоэлектронных атомов.	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3. Лабораторные занятия			
не предусмотрены учебным планом			

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)			
		Лекции	Практические	Самостоятельная работа	Всего
1	Физические основы квантовой	4	-	6	10

	механики				
2	Математические основы квантовой механики Шрёдингера	4	16	15	35
3	Простейшие применения аппарата квантовой механики	8	20	11	39
4	Движение в центральном поле. Атом водорода.	6	16	7	29
5	Спин элементарных частиц. Тожественность частиц.	2	-	12	14
6	Приближенные методы решения уравнения Шрёдингера. Одноэлектронная модель.	10	16	11	37
7	Многоэлектронные атомы	2	4	10	16
	Итого:	36	72	72	180

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.

Текущая аттестация обеспечивает проверку освоения учебного материала, приобретения знаний, умений и навыков в процессе аудиторной и самостоятельной работы студентов (ОПК-3 и ОПК-4). Она включает 2 контрольные работы. При подготовке к текущей аттестации студенты изучают рекомендованную преподавателем литературу по темам лекционных и лабораторных занятий, самостоятельно осваивают понятийный аппарат и закрепляют теоретические знания. Текущая аттестация является обязательной, её результаты оцениваются в балльной системе и учитываются при промежуточной аттестации обучающихся. Итоговая оценка на промежуточной аттестации складывается следующим образом: ответ на экзамене (40%); работа на лабораторных занятиях (20%), контрольная работа № 1 (20%); контрольная работа № 2 (20%).

Обучение лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с учетом их индивидуальных психофизических особенностей. Для лиц с нарушением слуха информация по учебной дисциплине предоставляется на бумажном или электронном носителе, допускается присутствие ассистентов и сурдопереводчиков на занятиях. Промежуточная аттестация для таких студентов проводится в письменной форме с общими критериями оценивания; при необходимости время подготовки на экзамене может быть увеличено.

Для лиц с нарушением зрения допускается аудиальное предоставление информации с использованием программ-синтезаторов речи, а также использование звукозаписывающих устройств на лекциях. На занятиях также может присутствовать ассистент. При проведении промежуточной аттестации для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование; время подготовки на экзамене может быть увеличено.

Студенты с нарушениями опорно-двигательного аппарата могут проходить часть занятий дистанционно. Промежуточная аттестация для них проводится на общих основаниях, при необходимости процедура экзамена может быть реализована дистанционно.

При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), сервисы видеоконференций (BigBlueButton), электронная почта, мессенджеры и соцсети.

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.
2	Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов / Барановский В. И.. — 4-е изд., стер. –Санкт-Петербург: Лань, –2024. –428 с.
3	Квантовая механика: учебное пособие для вузов / И. В. Копытин. –Москва: Юрайт, –2022. – 242 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
1	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.
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.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
1	Зональная научная библиотека www.lib.vsu.ru
2	ЭУМК «Квантовая механика и квантовая химия» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9931
3	www.elibrary.ru – Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU - крупнейший российский информационный портал в области науки, технологии, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 12 млн. научных статей и публикаций. На платформе eLIBRARY.RU доступны электронные версии более 1400 российских научно-технических журналов, в том числе более 500 журналов в открытом доступе.

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	Квантовая физика и элементы квантовой механики: Учебник для вузов / Р.А. Беданов – Санкт-Петербург: Лань, –2024. –116 с. –Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. –URL: https://e.lanbook.com/book/426242
2	Квантовая теория: учебное пособие / А.В. Ханефт –Кемерово: Кемеровский государственный университет –2023. –220 с. –Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. –URL: https://e.lanbook.com/book/407741

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>), взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Учебная аудитория (439): доска магнитная меловая мультимедиа-проектор, ноутбук, проектор, экран для проектора.

Помещение для самостоятельной работы обучающихся, компьютерный класс (ауд. 271): специализированная мебель, компьютеры с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ВГУ.

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)

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
2.	Математические основы квантовой механики Шредингера.	ОПК-3 ОПК-4	ОПК-3.2 ОПК-4.1	Решение задач (аудиторное задание)
3.	Простейшие применения аппарата квантовой механики.	ОПК-3 ОПК-4	ОПК-3.1 ОПК-4.1 ОПК-4.2	Контрольная работа
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

20. Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1. Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: лабораторные работы, тесты, контрольные работы.

Примеры заданий, входящих в комплект тестов:

20.1.1. Перечень теоретических 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. Дать частичное или полное исследование структуры электронного облака атома водорода по предложенной атомной орбитали.
13. Изобразить графически функции плотности вероятности нахождения электрона атома водорода: $r^2 R_{nl}^2(r)$, $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$ и $|\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2$.
14. Изобразить энергетическую диаграмму электрона в атоме водорода с учетом кратности вырождения энергетических уровней.
15. Вычислить средние значения потенциальной и кинетической энергий электрона в атоме водорода.
16. Построить диаграмму пространственного квантования вектора момента импульса электрона атома водорода.
17. Изобразить энергетическую диаграмму многоэлектронного атома с учетом кратности вырождения энергетических уровней электронов.
18. Записать уравнение Шредингера для предложенной молекулы.
19. Определить терм предложенного атома.

20.1.2. Перечень практических заданий

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. Рассчитать среднее значение динамической переменной в заданном квантовом состоянии.
8. Назвать полный набор физических величин в заданном квантовом состоянии.
9. Провести полное исследование пространственного распределения электронной плотности в возбужденном состоянии атома водорода (до $n = 3$ включительно).
10. На основе вида волновой функции электрона атома водорода, находящегося в возбужденном состоянии, указать направление внутриатомного электрического тока.
11. Указать значения всех динамических переменных, характеризующих состояние электрона атома водорода в заданном энергетическом состоянии.

20.1.3. Примеры заданий для контрольных работ

Контрольная работа № 1

1. Доказать коммутаторное соотношение для операторов **A**, **B**, **C**:

$$[\mathbf{A}, \mathbf{BC}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{C} + \mathbf{B}[\mathbf{A}, \mathbf{C}].$$

2. Найти собственные функции и собственные значения операторов:

$$x + i \cdot d/dx; \quad ix + i \cdot d/dx; \quad x^3 + i \cdot d/dx.$$

3. Непосредственным вычислением установить, ортогональны ли собственные функции оператора

$$\mathbf{A} = i \cdot d/dx + 1,$$

принадлежащие разным собственным значениям. Ответ комментировать.

Контрольная работа № 2

1. Частица находится в основном состоянии линейного гармонического осциллятора:

$$\Psi(x) = (m\omega_0/\pi\hbar)^{1/4} \cdot \exp(-m\omega_0 x^2/2\hbar).$$

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 **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?

3. Дана пара комплексных орбиталей атома водорода:

$$\Psi_{32\pm 2} = Cr^2 \cdot e^{-r/3a} \cdot \sin^2\Theta \cdot e^{\pm 2i\varphi},$$

a – радиус первой боровской орбиты.

- а) Провести полное исследование одной из этих орбиталей, построив необходимые иллюстрации в эскизной форме: $W_{nl}(r)$, $W_{lm}(\Theta)$, «фотографию» электронного облака.
б) Перейти к действительной атомной орбитали $\Psi''_{32\pm 2}$ и повторить ее исследование.
в) Установить знаки действительной атомной орбитали в пространстве.

20.2. Промежуточная аттестация

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, а также практические задачи, 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.

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Перечень вопросов к экзамену:

1. Экспериментальные основы квантовой механики. Излучение абсолютно чёрного тела, фотоэффект, боровская модель атома.
2. Физические основы квантовой механики. Волна де-Бройля и соотношение неопределённостей.
3. Математические основы квантовой механики Шрёдингера. Свойства собственных функций операторов, обладающих дискретным спектром.
4. Постулаты квантовой механики.
5. Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
6. Одномерный гармонический осциллятор в квантовой механике.
7. Прохождение частицы под потенциальным барьером. Туннельный эффект.
8. Частица в одномерной потенциальной яме с одной бесконечно высокой стенкой.
9. Частица в одномерной потенциальной яме конечной глубины.
10. Движение в центральном поле. Жёсткий ротатор.

11. Состояние электрона в водородоподобном атоме.
12. Функция радиального распределения электронной плотности в атоме водорода.
13. Функция углового распределения электронной плотности в атоме водорода.
14. Действительные орбитали атома водорода.
15. Спин элементарных частиц.
16. Вариационный метод.
17. Одноэлектронное приближение и метод самосогласованного поля Хартри-Фока.
18. Теория возмущений.
19. Многоэлектронные атомы.

Пример билета (КИМ):

Направление подготовки 04.03.01 Химия Дисциплина Квантовая механика и квантовая химия Форма обучения очная Вид контроля экзамен	УТВЕРЖДАЮ: Заведующий кафедрой физической химии д.х.н., доц. _____ О.А. Козадеров _____ .20__
Контрольно измерительный материал № 19	
1. Многоэлектронные атомы. 2. Частица находится в первом возбуждённом состоянии линейного гармонического осциллятора. Найти вероятность пребывания этой частицы в области, запрещённой для классического движения. 3. Доказать, что если $[A, B] = 1$, то $[A^2, B^2] = 2(AB + BA)$.	
Преподаватель _____ подпись	_____ расшифровка подписи

Подготовка к промежуточной аттестации является формой самостоятельной работы студентов. При этом обучающийся должен использовать рекомендованный рабочей программой перечень основной и дополнительной литературы, материалы лекций, информационные и электронно-образовательные ресурсы.

Промежуточная аттестация проводится в письменной форме. Преподаватель, проводящий промежуточную аттестацию, имеет право задавать студентам дополнительные вопросы по всему разделу программы учебной дисциплины. Время проведения экзамена устанавливается нормами времени. Результат сдачи промежуточной аттестации заносится преподавателем в зачетно-экзаменационную ведомость и зачетную книжку.

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

Критерии оценивания компетенций при промежуточной аттестации

Критерии оценивания 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.	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).	Хорошо
Обучающийся частично владеет теоретическими основами дисциплины, показывая фрагментарное владение программой курса. Неуверенно применяет теоретические знания для решения практических задач в области квантовой	Удовлетворительно

химии. Не умеет решать задачи на вычисления.	
Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допуская при ответе грубые ошибки. К освоению учебной дисциплины «Строение вещества» не подготовлен.	Неудовлетворительно

При реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий оценки за экзамен/зачет могут быть выставлены по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре. По результатам всех выполненных заданий текущего контроля студентам может быть выставлена экзаменационная оценка автоматически:

средняя оценка 3-3,75 – «удовлетворительно»,

3,75-4,5 – «хорошо»,

4,5-5 – «отлично».

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

– в печатной форме увеличенным шрифтом,

– в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

– в печатной форме,

– в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

– в печатной форме,

– в форме электронного документа.

Данный перечень, может быть, конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

20.3. Фонды оценочных средств для проведения диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения дисциплины

ОПК-1

Тестовые задания закрытого типа

1. Определите импульс фотона (кг·м)/с, длина волны которого $3,01 \cdot 10^{-8}$ м?

($h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с)

1. $2,20 \cdot 10^{-26}$;

2. $19,93 \cdot 10^{-42}$;

3. $2,20 \cdot 10^{-42}$;

4. $19,93 \cdot 10^{-26}$.

2. Две физические величины могут быть одновременно измерены в одном эксперименте с точностью, ограниченной лишь возможностью измерительных приборов в том случае, если ...

1. их операторы коммутируют с оператором Гамильтона;

2. полная энергия системы постоянна;

3. силовые поля не зависят от времени;

4. их операторы коммутируют между собой.
3. Вырождение состояний связано с ...
 1. свойством непрерывности волновой функции;
 2. граничными условиями, накладываемыми на волновую функцию;
 3. симметрией решаемой задачи;
 4. свойством непрерывности производной волновой функции.
4. Для одномерного гармонического осциллятора разница в энергии между соседними уровнями ...
 1. растёт с увеличением энергии;
 2. постоянна;
 3. падает с увеличением энергии;
 4. равна нулю.
5. Туннельный эффект это ...
 1. преодоление микрочастицей потенциального барьера в случае, когда её полная энергия равна высоте барьера;
 2. преодоление микрочастицей потенциального барьера в случае, когда её полная энергия больше высоты барьера;
 3. преодоление микрочастицей потенциального барьера в случае, когда её полная энергия меньше высоты барьера;
 4. отражение микрочастицы от потенциального барьера.
6. Особенность вариационного метода Ритца в том, что ...
 1. в пробную функцию f вводят несколько независимых параметров;
 2. полная энергия системы получается при решении векового уравнения;
 3. пробная функция f берётся в виде линейной комбинации независимых функций;
 4. интегралы перекрывания считаются равными нулю.
7. Особенность метода Хартри-Фока в том, что ...
 1. одноэлектронные уравнения решаются вариационным методом;
 2. для решения задачи используют метод последовательных приближений;
 3. полученные полные волновые функции могут быть только антисимметричными;
 4. у одноэлектронных функций не могут совпадать все четыре квантовых числа.

Ключи к тесту **ОПК-1**

Вопросы	1	2	3	4	5
Ответы	1	4	3	2	3
Вопросы	6	7			
Ответы	3	2			

Вопросы, требующие короткого ответа (одно слово)

1. В каких единицах измеряется постоянная Планка?

Ответ: Дж·с

2. Собственный момент импульса элементарной частицы – это...

Ответ: спин

3. Чем обусловлено квантование физических величин?

Ответ: граничными условиями, накладываемыми на волновую функцию

Вопросы, требующие развернутого ответа.

1. В чём суть адиабатического приближения в квантовой химии? Напишите стационарное уравнение Шрёдингера для молекулы в адиабатическом приближении.

Эталон ответа:

Адиабатическое приближение в квантовой химии представляет собой разделение системы на тяжёлые и лёгкие частицы — ядра и электроны. Поскольку масса любого ядра значительно больше массе электрона, оказывается что электроны — значительно более быстрая подсистема, чем ядра. Можно считать, что электроны движутся в поле неподвижных ядер.

$$(T_{\text{эл}} - U_{\text{эл-яд}} + U_{\text{эл-эл}})\Psi = (E - \epsilon)\Psi$$

Критерии оценивания:

10 баллов: правильно отражена суть адиабатического приближения и написано уравнение Шрёдингера

5 баллов: правильно отражена суть адиабатического приближения, но не написано уравнение Шрёдингера

3 балла: написано уравнение Шрёдингера, но не отражена суть адиабатического приближения

0 баллов: дан неверный ответ

2. В чём суть одноэлектронного приближения в методе Хартри-Фока? Как представляется оператор отталкивания электронов в данном приближении?

Эталон ответа:

Из всего коллектива электронов выделяется один и считается, что действие всех остальных электронов на этот выбранный можно приближённо описать действием усреднённого силового поля, в котором потенциальная энергия выбранного электрона зависит только от его собственных координат.

$$U_{\text{эл-эл}} = \sum (U_i(x_i, y_i, z_i))$$

Критерии оценивания:

10 баллов: правильно отражена суть одноэлектронного приближения и написан оператор отталкивания электронов

5 баллов: правильно отражена суть одноэлектронного приближения, но не написан оператор отталкивания электронов

3 балла: написан оператор отталкивания электронов, но не отражена суть одноэлектронного приближения

0 баллов: дан неверный ответ

ОПК-3

Тестовые задания закрытого типа

1. Какому условию должна удовлетворять длина волны света λ , падающего на поверхность металла, чтобы началось явление фотоэффекта?

A — работа выхода электрона;

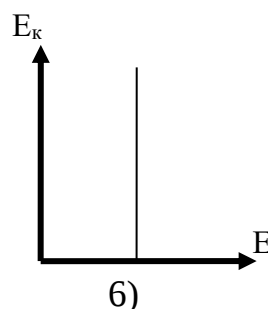
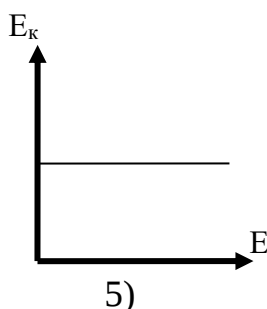
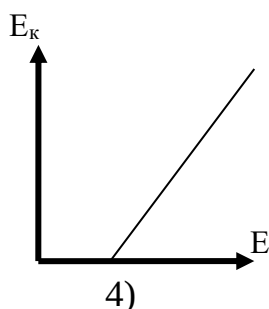
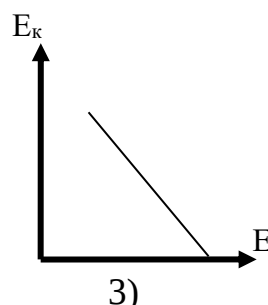
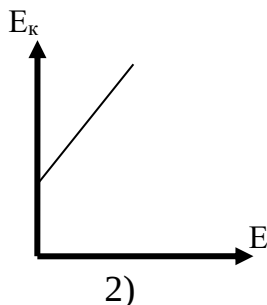
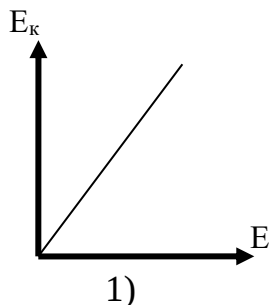
h — постоянная Планка;

ν — частота;

E_k — энергия электрона.

1. $\lambda \geq A/h$;
2. $\lambda \leq hc/A$;
3. $\lambda > E_k/h$;
4. $\lambda > hc/A$.

2. На каком из приведенных графиков правильно отражена зависимость максимальной кинетической энергии (E_k) электрона, вылетающего с поверхности металла, от энергии фотона (E), падающего на поверхность металла?



3. Какое из перечисленных ниже оптических явлений получило объяснение на основе квантовой теории света?

1. дифракция;
2. дисперсия;
3. фотоэффект;
4. интерференция.

4. Принцип неопределённости Гейзенберга в квантовой механике устанавливает предел точности одновременного определения пары характеризующих систему наблюдаемых величин, описываемых...

1. током и напряжением;
2. силовыми полями;
3. некоммутирующими операторами;
4. координатой и импульсом.

5. Гипотеза Луи де Бройля состоит в том, что ...

1. все частицы обладают волновыми свойствами;
2. свет представляет собой совокупность частиц (квантов, фотонов);
3. свет — это электромагнитная волна;
4. каждой волне можно поставить в соответствие виртуальную частицу.

6. Волновая функция дает возможность ...

1. предсказать, какие значения всех измеряемых величин будут наблюдаться на опыте и с какой вероятностью;
2. описать траекторию движения частицы;
3. получить информацию о значении координат и импульса частицы;
4. получить информацию о значениях кинетической и потенциальной энергии частицы.

7. При измерении физической величины будет получаться одно и то же значение, если ...

1. оператор этой физической величины коммутирует с оператором Гамильтона;
2. система находится в стационарном состоянии;
3. силовые поля не зависят от времени;
4. волновая функция является собственной функцией оператора этой физической величины.

Ключи к тесту ОПК-3

Вопросы	1	2	3	4	5
Ответы	2	4	3	3	1
Вопросы	6	7			
Ответы	2	4			

Вопросы, требующие короткого ответа (одно слово)

1. Как изменится максимальная энергия фотоэлектронов, если, не меняя частоты падающего света, увеличить его интенсивность в два раза?

Ответ: не изменится

2. Для наблюдения спектральных линий атома водорода, находящихся в видимой части спектра, необходим переход электрона с вышележащих энергетических уровней на ... уровень. Добавьте пропущенное слово - порядковый номер уровня.

Ответ: на первый

3. Укажите основную характеристику для потенциальной энергии частицы, движущейся в центральном поле.

Ответ: потенциальная энергия движущейся частицы зависит только от расстояния до силового центра

Вопросы, требующие развернутого ответа

1. Жёсткий ротатор находится в состоянии с орбитальным квантовым числом $l = 2$. Какова кратность вырождения данного состояния? Чему равны возможные значения проекции момента импульса на ось z ?

Эталон ответа:

Кратность вырождения равна 5.

возможные значения проекции момента импульса на ось z : $-2\hbar$, $-\hbar$, 0 , $\hbar$, $2\hbar$.

Критерии оценивания:

10 баллов: правильно определена кратность вырождения и возможные значения проекции момента импульса на ось z

5 баллов: правильно определена кратность вырождения, но не определены возможные значения проекции момента импульса на ось z

0 баллов: дан неверный ответ

2. Частица массой m находится в трёхмерной кубической потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Как определить, какая комбинация квантовых чисел n_1 , n_2 и n_3 соответствует энергетическому уровню № k ? Определите кратность вырождения энергетического уровня № 7 и его квантовые числа.

Эталон ответа:

Чтобы определить комбинацию квантовых чисел n_1 , n_2 и n_3 , соответствующую энергетическому уровню № k , необходимо найти k -ую по величине сумму их квадратов.

Кратность вырождения энергетического уровня № 7 равна 3.

Возможные комбинации квантовых чисел: 2,2,3; 2,3,2; 3,2,2.

Критерии оценивания:

10 баллов: правильно описан метод определения комбинации квантовых чисел, соответствующих энергетическому уровню № k , определена кратность вырождения 7-го уровня и комбинации квантовых чисел.

5 баллов: правильно описан метод определения комбинации квантовых чисел, соответствующих энергетическому уровню № k , но не определена кратность вырождения 7-го уровня и комбинации квантовых чисел

0 баллов: дан неверный ответ

3. Как получить явный вид оператора заданной физической величины? Получите явный вид оператора проекции скорости на ось x .

Эталон ответа:

Чтобы получить явный вид оператора заданной физической величины, нужно использовать соотношения между физическими величинами из классической механики и первичные операторы, явный вид которых постулирован.

Соотношение между проекциями скорости и импульса на ось x из классической механики $V_x = P_x/m$.

Оператор $V_x = -i\hbar/m \cdot \partial/\partial x$

Критерии оценивания:

10 баллов: правильно описан способ получения явного вида оператора заданной физической величины, найден оператор проекции скорости на ось x .

5 баллов: правильно описан способ получения явного вида оператора заданной физической величины, но не найден оператор проекции скорости на ось x

0 баллов: дан неверный ответ