

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"**

Кафедра теоретической физики

Авторы-составители: **Хеннер Виктор Карлович**
Кадыров Дальво Ибрагимович

Рабочая программа дисциплины
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ
Код УМК 64561

Утверждено
Протокол №6
от «08» июня 2020 г.

Пермь, 2020

1. Наименование дисциплины

Квантовая механика и квантовая химия

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в вариативную часть Блока « Б.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Направление: **04.03.01** Химия

направленность Программа широкого профиля

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Квантовая механика и квантовая химия** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

04.03.01 Химия (направленность : Программа широкого профиля)

ОПК.1 знать основные теории, учения и концепции в профессиональной области

ПК.3 владеть системой фундаментальных химических понятий

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	04.03.01 Химия (направленность: Программа широкого профиля)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	9
Объем дисциплины (з.е.)	2
Объем дисциплины (ак.час.)	72
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	28
Проведение лекционных занятий	14
Проведение практических занятий, семинаров	14
Самостоятельная работа (ак.час.)	44
Формы текущего контроля	Входное тестирование (1) Итоговое контрольное мероприятие (1) Письменное контрольное мероприятие (2)
Формы промежуточной аттестации	Зачет (9 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Квантовая механика и квантовая химия. Первый семестр

Введение

Основные принципы механики.

Основные принципы механики

Уравнения движения материальной точки. Системы координат. Поступательное движение, движение ионов в электрическом поле, проводимость растворов.

Движение заряженной частицы в магнитном поле.

Определение центра масс молекул, лабораторная система координат (ЛСК) и система центра масс (СЦМ).

Вращение молекул. Кинетическая энергия вращения, тензор инерции молекул, угловой момент, главные оси и главные моменты инерции молекул, молекулярная система координат.

Классификация молекул по вращательным свойствам.

Колебания молекул в классической механике

Уравнения Лагранжа и уравнения Гамильтона.

Линейные колебания систем со многими степенями свободы. Уравнения Гамильтона, функция Гамильтона.

Уравнения Лагранжа

Недостаточность ньютоновской механики для описания систем со связями. Уравнения Лагранжа, функция Лагранжа и ее свойства. Функция Лагранжа двухатомной молекулы. Малые колебания двухатомной молекулы, потенциал Морза.

Линейные колебания систем со многими степенями свободы

Линейные колебания систем со многими степенями свободы, нормальные координаты. Классификация молекулярных колебаний. Колебания линейной симметричной трехатомной молекулы.

Уравнения Гамильтона

Уравнения Гамильтона, функция Гамильтона. Функция Гамильтона атомов и молекул.

Планетарная модель атома водорода

Планетарная модель атома водорода.

Недостатки классической модели атомов и молекул. Постулаты Бора.

Планетарная модель атома водорода. Излучение энергии ускоренно движущейся заряженной частицы, недостатки классической модели атомов и молекул. Постулаты Бора.

Волновые свойства электрона.

Гипотеза де Бройля. Корпускулярно-волновой дуализм. Дифракция электронов.

Волновое уравнение, волновая функция.

Волновое уравнение, волновая функция. Операторы в квантовой механике и их свойства. Операторы координаты, энергии и импульса.

Основы квантовой механики

Основные положения квантовой механики. Математические постулаты квантовой механики, принцип неопределенности, соотношение неопределенностей Гейзенберга

Уравнение Шредингера для одномерного движения. Прямоугольная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками. Туннелирование через барьер, растровый туннельный микроскоп. Гармонический

осциллятор в квантовой механике. Колебательные уровни энергии двухатомной молекулы.

Основные положения квантовой механики

Математические постулаты квантовой механики, принцип неопределенности, соотношение неопределенностей Гейзенберга.

Уравнение Шредингера для одномерного движения

Уравнение Шредингера для одномерного движения. Прямоугольная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками. Туннелирование через барьер, растровый туннельный микроскоп.

Гармонический осциллятор в квантовой механике

Гармонический осциллятор в квантовой механике. Гамильтониан осциллятора. Уровни энергии. Операторы рождения и уничтожения. Полиномы Чебышева-Эрмита. Колебательные уровни энергии двухатомной молекулы.

Атом водорода

Атом водорода.

Частица на окружности: энергетический спектр и собственные функции.

Частица на окружности: энергетический спектр и собственные функции.

Оператор момента импульса. Собственные значения и собственные функции. Спин электрона.

Оператор момента импульса. Собственные значения и собственные функции. Матрицы Паули и их свойства. Описание состояния квантовой частицы с полуцелым спином. Спин. Магнитный момент электрона.

Энергетические уровни водородоподобных атомов. Атомные орбитали.

Сложение двух квантовых моментов. Энергетические уровни водородоподобных атомов. Атомные орбитали водородоподобных атомов, спин-орбитали.

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

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

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Ландау Л. Д. Теоретическая физика. учебное пособие для студентов физических специальностей университетов : в 10 т. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория)/Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; ред. Л. П. Питаевский. -5-е изд., стер..-Москва:ФИЗМАТЛИТ,2004, ISBN 5-9221-0530-2.-800
2. Боженко, К. В. Основы квантовой химии : учебное пособие / К. В. Боженко. — Москва : Российский университет дружбы народов, 2010. — 128 с. — ISBN 978-5-209-03510-7. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/11404>

Дополнительная:

1. Савельев И. В. Курс общей физики. учебное пособие : в 3 т. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц/И. В. Савельев.-8-е изд., стер..- Санкт-Петербург:Лань,2007, ISBN 978-5-8114-0632-6.-320
2. Магазинников А. Л. Введение в квантовую механику:Учебное пособие/Магазинников А. Л..- Томск:Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,2012, ISBN 978-5-4332-0046-3.-112. <http://www.iprbookshop.ru/13860>

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

<http://library.psu.ru/node/738> Ресурсы Научной библиотеки ПГНИУ

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательный процесс по дисциплине **Квантовая механика и квантовая химия** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

- доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС)
- доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.
- Интернет-сервисы и электронные ресурсы (поисковые системы, электронная почта и т.д.)

Перечень необходимого лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения:

- приложение, позволяющее просматривать PDF-файлы
- офисный пакет приложений «LibreOffice».

Дополнительный перечень используемых информационных технологий и программного обеспечения определяется преподавателями дисциплины.

При освоении материала и выполнения заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (student.psu.ru).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

- система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).
- система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.
- система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для лекционных занятий требуется аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

Для проведения практических занятий - аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

Для групповых (индивидуальных) консультаций - аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

Для проведения текущего контроля - аудитория, оснащенная меловой (и) или маркерной доской.

Самостоятельная работа студентов: аудитория, оснащенная компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», с обеспеченным доступом в электронную информационно-

образовательную среду университета, помещения Научной библиотеки ПГНИУ.

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Квантовая механика и квантовая химия**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции и
критерии их оценивания**

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ПК.3 владеть системой фундаментальных химических понятий</p>	<p>Знать: основные понятия и положения классической и квантовой механики. Уметь: получать уравнения движения систем материальных точек, вычислять энергетические спектры простых систем. Владеть: методами описания механических систем в рамках классической и квантовой теории</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>Не знает: основные понятия и положения классической и квантовой механики. Не умеет: получать уравнения движения систем материальных точек, вычислять энергетические спектры простых систем. Не владеет: методами описания механических систем в рамках классической и квантовой теории.</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>Общие, но не структурированные знания основных понятий и положений классической и квантовой механики. Демонстрирует частично сформированное умение получать уравнения движения систем материальных точек, вычислять энергетические спектры простых систем. Имеет представление о методах описания механических систем в рамках классической и квантовой теории.</p> <p align="center">Хорошо</p> <p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания основных понятий и положений классической и квантовой механики. В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы умения получать уравнения движения систем материальных точек. В целом успешно, но с отдельными пробелами владеет методами описания механических систем в рамках классической и квантовой теории.</p> <p align="center">Отлично</p> <p>Сформированные систематические знания основных понятий и положений классической и квантовой механики. Сформированное умение получать уравнения движения систем материальных</p>

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>точек, вычислять энергетические спектры простых систем. Успешное и систематическое применение навыков описания механических систем в рамках классической и квантовой теории.</p>
<p>ОПК.1 знать основные теории, учения и концепции в профессиональной области</p>	<p>Знать: основы теории строения атома, понятие спина. Уметь: находить собственные значения энергии и собственные функции электрона в поле ядра. Владеть: методами решения задач квантовой механики, основами операторного метода.</p>	<p style="text-align: center;">Неудовлетворител</p> <p>Не знает основы теории строения атома, понятие спина. Не умеет находить собственные значения энергии и собственные функции электрона в поле ядра. Не владеет методами решения задач квантовой механики, основами операторного метода.</p> <p style="text-align: center;">Удовлетворительн</p> <p>Общие, но не структурированные знания основ теории строения атома, понятия спина. Демонстрирует частично сформированное умение находить собственные значения энергии и собственные функции электрона в поле ядра. Имеет представление о методах решения задач квантовой механики, основами операторного метода.</p> <p style="text-align: center;">Хорошо</p> <p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания основ теории строения атома, понятия спина. В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы умения находить собственные значения энергии и собственные функции электрона в поле ядра. В целом успешно, но с отдельными пробелами владеет методами решения задач квантовой механики, основами операторного метода.</p> <p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>Сформированные систематические знания основ теории строения атома, понятия спина. Сформированное умение находить собственные значения энергии и собственные функции электрона в поле ядра. Успешное и систематическое применение навыков решения задач квантовой механики, основами операторного метода.</p>

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : СУОС

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Зачет

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 50 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 50 балла

Компетенция	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
Входной контроль	Основные принципы механики Входное тестирование	Основы классической механики
ПК.3 владеть системой фундаментальных химических понятий	Волновое уравнение, волновая функция. Письменное контрольное мероприятие	Элементы классической механики. Подход Лагранжа и Гамильтона. Волновые свойства частиц, модель атома Бора.
ОПК.1 знать основные теории, учения и концепции в профессиональной области ПК.3 владеть системой фундаментальных химических понятий	Гармонический осциллятор в квантовой механике Письменное контрольное мероприятие	Формализм волновой механики. Одномерные задачи. Туннельный эффект и эффект Рамзауэра. Гармонический осциллятор.
ОПК.1 знать основные теории, учения и концепции в профессиональной области	Энергетические уровни водородоподобных атомов. Атомные орбитали. Итоговое контрольное мероприятие	Оператор момента импульса. Строение и энергетический спектр атома водорода.

Спецификация мероприятий текущего контроля

Основные принципы механики

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **.5 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **0**

Проходной балл: **0**

Показатели оценивания	Баллы
Закон сохранения механической энергии	5
Законы Ньютона	5

Волновое уравнение, волновая функция.

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **.5 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **15**

Показатели оценивания	Баллы
Функция Лагранжа и Гамильтона. Уравнения движения классических механических систем.	8
Постулаты Бора. Планетарная модель атома водорода	8
Волны де Бройля. Волновая функция. Вероятностная интерпретация	7
Недостатки классической модели атома Резерфорда	7

Гармонический осциллятор в квантовой механике

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **.5 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **15**

Показатели оценивания	Баллы
Решения уравнения Шредингера для простых систем	15
Финитное и инфинитное движение, энергетические спектры	8
Собственные функции гармонического осциллятора	7

Энергетические уровни водородоподобных атомов. Атомные орбитали.

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **.5 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **40**

Проходной балл: **20**

Показатели оценивания	Баллы
Ротатор. Частицы на окружности	10
Энергетические уровни водородоподобных ионов. Атомные орбитали.	10
Спин электрона.	10
Оператор момента импульса. Собственные значения и функции. Сферические гармоники.	10