

Министерство образования и науки Российской Федерации  
**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования**  
«Владимирский государственный университет  
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»  
(ВлГУ)



Проректор

По учебно-методической работе

А.А. Панфилов

«28» октября 2015 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Квантовая химия**

Направление подготовки – 04.04.01 – Химия

Программа подготовки – Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность

Уровень высшего образования: магистратура

Форма обучения – очная

| Семестр | Трудоём-<br>кость<br>зач. ед.<br>(час.) | Лекций,<br>час. | Практич.<br>занятий,<br>час. | Лаборат.<br>работ,<br>час. | СРС,<br>час. | Форма<br>промежуточного<br>контроля<br>(экз./зачёт) |
|---------|---|-----------------|------------------------------|----------------------------|--------------|---|
| 3       | 3 (108)                                 | 18              | 18                           | -                          | 72           | зачёт   |
| Итого   | 3 (108)                                 | 18              | 18                           | -                          | 72           | зачёт   |

Владимир, 2015

*Handwritten signature*

## 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

*Целями освоения дисциплины* «Квантовая химия» являются формирование у обучающихся общетеоретических представлений о физических основах методов квантовой химии, знакомство в необходимых пределах с математическим аппаратом квантовомеханической теории и разъяснение смысла вводимых при этом понятий.

### *Задачи курса.*

В результате изучения данного курса студент должен освоить основные понятия квантовой механики, на которых строится теоретическая база квантовой химии, основные методы решения уравнения Шрёдингера для стационарных систем, каковыми являются системы молекулярные.

Как известно, уравнение Шрёдингера точно решено только для водородоподобных атомов, поэтому в квантовой химии имеют исключительное значение численные методы. В курсе рассматриваются расчеты, позволяющие предсказать геометрическое строение, энергию и другие свойства известных и неизвестных молекул.

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Квантовая химия» изучается в вариативной части учебного плана.

Перечень дисциплин, необходимых для успешного изучения дисциплины «Квантовая химия».

1. Математика.
2. Информатика.
3. Обработка результатов химического эксперимента.
4. Численные методы в химии.
5. Системное моделирование химических процессов
6. Общая и неорганическая химия.
7. Физика (некоторые аспекты обработки эксперимента).

Освоение дисциплины «Квантовая химия» необходимо как предшествующее для изучения следующих дисциплин:

1. Современные методы исследования в химии.
2. Математическое моделирование.
3. Физико-химическая механика.

### **3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

В процессе освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие компетенции:

- Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2).

В результате освоения данной дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

#### **1) Знать:**

- Основные понятия квантовой механики, лежащие в основе квантовохимических представлений (ПК-2).
- Суть математического описания стационарных молекулярных систем и методов решения соответствующего уравнения Шрёдингера (ПК-2).
- Методы численного решения угловой и радиальной части уравнения Шрёдингера (ПК-2).

#### **2) Уметь:**

- Профессионально пользоваться основными теоретическими понятиями квантовой химии (ПК-2).
- Разбираться в основных методиках приближённого решения квантовомеханических задач (ПК-2).

#### **3) Владеть:**

- Общеуниверситетской методикой квантовомеханического описания микромира (ПК-2).
- Основами методик построения квантовохимического описания атомов и молекулярных систем (ПК-2).
- Основными численными методами решения прикладных задач квантовой химии (ПК-2).

#### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зачётных единиц, 108 часов.

| №<br>п/<br>п | Раздел дисциплины   | Семестр | Неделя семестра | Вид учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах). |                      |              |                    |     |       | Объем учебной работы с применением интерактивных методов (в часах.%) | Формы контроля успеваемости (по неделям семестра) . Форма промежуточной аттестации (по семестрам) |
|--------------|---|---------|-----------------|--|----------------------|--------------|--------------------|-----|-------|--|---|
|              |   |         |                 | Лекции   | Практические занятия | Лабораторные | Контрольные работы | СРС | КП/КР |  |   |
| 1            | Теоретические аспекты квантовой химии. Волновая функция. Физический смысл волновой функции.             | 3       | 1-3             | 2  | 2                    |              |                    | 8   |       | 2/50   |   |
| 2            | Описание квантовомеханических величин с помощью операторов.   | 3       | 4-6             | 4  | 2                    |              |                    | 16  |       | 2/33   | Рейтинг-контроль № 1  |
| 3            | Операторы основных физических величин. Гамильтониан.  | 3       | 7-8             | 2  | 2                    |              |                    | 8   |       | 2/50   |   |
| 4            | Уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера.  | 3       | 9-11            | 2  | 2                    |              |                    | 8   |       | 2/50   |   |
| 5            | Водородоподобные атомы. Уравнение Шрёдингера в сферических координатах.                                 | 3       | 12-14           | 4  | 2                    |              |                    | 16  |       | 2/33   | Рейтинг-контроль № 2  |
| 6            | Решение R-уравнения. Решение Ф-уравнения. Решение $\Theta$ -уравнения.                                  | 3       | 15-16           | 2  | 2                    |              |                    | 8   |       | 1/25   |   |
| 7            | Численный расчёт радиальной и угловой функций и атомных орбиталей в целом для различных квантовых чисел | 3       | 17-18           | 2  | 6                    |              |                    | 8   |       | 2/25   | Рейтинг-контроль № 3  |
|              | Всего   |         |                 | 18   | 18                   |              |                    | 72  |       | 13/36  | зачёт   |

## СОДЕРЖАНИЕ КУРСА

### **Часть I. Теоретические аспекты квантовой химии**

Теоретические аспекты квантовой химии. Волновая функция. Обобщённая координата. Физический смысл волновой функции. Свойства волновой функции. Основные постулаты квантовой механики. Описание квантовомеханических величин с помощью операторов. Линейные самосопряжённые операторы и их свойства. Операторы основных физических величин: координаты, проекции импульса, кинетической и потенциальной энергии. Гамильтониан. Общее уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера. Средние значения квантовомеханических величин. Собственные значения и собственные функции. Принцип суперпозиции. Принцип Паули.

### **Часть II. Квантовомеханическое описание строения одноэлектронных атомов**

Водородоподобные атомы. Решение уравнения Шрёдингера для одноэлектронных (водородоподобных) атомов. Преобразование в сферических (полярных) координатах и разделение переменных. Решение R-уравнения; полиномы Лягерра. Главное, орбитальное, магнитное и спиновое квантовые числа. Решение Ф-уравнения. Решение  $\Theta$ -уравнения; полиномы Лежандра. Угловая часть волновой функции.

### **Часть III. Приближённые методы решения стационарного уравнения Шрёдингера**

Численный расчёт полиномов Лягерра и Лежандра. Атомные орбитали; радиальная и угловая часть. Графическое представление радиальной и угловой части. Графическое представление полной  $\Psi$ -функции. Программирование радиальной и угловой функций и атомных орбиталей в целом для различных квантовых чисел.

## ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

1. Волновая функция. Физический смысл волновой функции.
2. Описание квантовомеханических величин с помощью операторов.
3. Рейтинг-контроль № 1.
4. Операторы основных физических величин.

5. Уравнение Шрёдингера. Водородоподобные атомы.
6. Рейтинг-контроль № 2.
7. Приближённые методы решения стационарного уравнения Шрёдингера. Решение R-уравнения; полиномы Лягерра.
8. Решение Ф-уравнения. Решение  $\Theta$ -уравнения; полиномы Лежандра.
9. Программирование радиальной и угловой функций и атомных орбиталей в целом для различных квантовых чисел.
10. Рейтинг-контроль № 3 (итоговый).

## **5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**

Изложение теоретического материала осуществляется с применением электронных средств обучения.

Некоторые разделы теоретического курса рассматриваются с использованием опережающей самостоятельной работы: студенты получают задание на изучение нового материала до его изложения на лекции.

Используются активные и интерактивные формы обучения: компьютерные симуляции вычислительных алгоритмов, разбор конкретных примеров для рассматриваемых алгоритмов. При чтении лекций могут применяться экспромтные психологические этюды.

Для оценки освоения теоретического материала студентами используются письменные контрольные работы и устный опрос.

## **6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ.**

### **Вопросы к рейтинг-контролю:**

#### **Рейтинг-контроль №1**

1. В чём заключается физический смысл волновой функции?
2. В чём состоит принципиальное различие волновой функции свободно движущейся частицы и частицы, находящейся в замкнутом пространстве?
3. Какая величина сохраняется неизменной при переходе от классического уравнения движения к уравнению Шрёдингера?
4. В чём отличие уравнения Шрёдингера для ситуации, которая может развиваться во времени, от стационарного уравнения Шрёдингера?
5. Что такое боровский радиус атома и как он связан с представлением о распределении электронной плотности в пространстве вокруг ядра атома и выбранной системы координат?
6. Каков общий вид волновых функций атома водорода? Что такое гибридизация и как понятие гибридизации связано с вырождением состояния электрона, находящегося в поле атомного ядра?
7. Какой физический смысл имеет нормировка волновой функции и зачем эта операция производится?
8. Какой физический смысл имеет принцип ортогональности волновых функций для разных состояний?

#### **Рейтинг-контроль №2**

1. Что такое водородоподобные атомы?
2. Основные принципы решения уравнения Шрёдингера для одноэлектронных (водородоподобных) атомов.
3. К чему приводит преобразование в сферических (полярных) координатах и разделение переменных?
4. Решение R-уравнения; полиномы Лягерра.
5. Что такое главное, орбитальное, магнитное и спиновое квантовые числа?

6. Решение  $\Phi$ -уравнения.
7. Решение  $\Theta$ -уравнения; полиномы Лежандра.
8. Как представляется угловая часть волновой функции?

### **Рейтинг-контроль №3**

1. При любом экспериментальном определении распределения электронной плотности в пространстве около ядра мы будем наблюдать сферическую симметрию. Нет ли здесь противоречия с утверждением о появлении неправильных электронных распределений при наличии гибридизации? Почему реальная гибридизация наблюдается только в том случае, если атомы объединены в молекулы?
2. Как можно упрощенно объяснить тот факт, что уровни энергии в атоме водорода сближаются по мере приближения значения энергии к верхней границе потенциальной ямы?
3. Какая связь имеется между принципом Паули и пространственными формами молекул? Могли бы существовать вполне определённые пространственные формы молекул, если бы принцип Паули не выполнялся?
4. Что такое принцип максимального перекрывания и как с его помощью можно приближенно объяснить и построить пространственные формы типичных органических молекул?
5. Что нового вносит в описание атомов приближение многих частиц, когда около атома имеется не один, а много электронов?
6. Какой основной принцип заложен в любой приближенный метод решения уравнения Шрёдингера?
7. Какая оценка значения энергии получится, если воспользоваться наиболее простым и употребительным методом Ритца? Получится эта оценка заниженной или завышенной?
8. С помощью какого приёма можно добиться, чтобы найденные вариационным методом значения уровня энергии как можно более близко соответствовали реальным уровням энергии?

### **Вопросы для самостоятельной работы студентов:**

1. Можно ли измерить фазовую скорость? Дать пояснение.
2. Фазовая скорость волн Де Бройля больше скорости света в вакууме. Не противоречит ли это постулатам теории относительности? Дать пояснение.



3. Используя соотношение неопределенности  $\Delta x \Delta p_x > \hbar$  найти выражение, позволяющее оценить минимальную энергию  $E_{\min}$  электрона, находящегося в однородном потенциальном ящике шириной  $l$ .

4. В потенциальном бесконечно глубоком ящике энергия электрона  $E$  точно определена. Значит точно определено и значение квадрата импульса электрона  $p^2 = 2mE$ . С другой стороны, электрон заперт в ограниченной области пространства с линейными размерами  $l$ . Не противоречит ли это соотношению неопределенности? Дать пояснение.

5. Написать уравнение Шредингера для линейного гармонического осциллятора. Учесть, что сила, возвращающая частицу в положение равновесия,  $f = -\beta x$  (где  $\beta$  – коэффициент пропорциональности,  $x$  – смещение).

6. Почему при физической интерпретации волновой функции говорят не о самой  $\psi$  – функции, а о квадрате ее модуля  $|\psi|^2$ ?

7. Чем обусловлено требование конечности  $\psi$  – функции?

8. Уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(U - E)\psi = 0.$$

Обосновать, исходя из этого уравнения, требования, предъявляемые к волновой функции – ее непрерывность и непрерывность первой производной от волновой функции.

9. Может ли  $|\psi(x)|^2$  быть больше единицы? Дать пояснение.

10. Показать, что для  $\psi$  – функции имеет место равенство  $|\psi(x)|^2 = \psi(x)\psi^*(x)$ , где  $\psi^*(x)$  означает функцию, комплексно сопряженную  $\psi(x)$ .

11. Электрону в потенциальном ящике шириной  $l$  отвечает волновой вектор

$$k = \frac{\pi n}{l} \text{ (где } n = 1, 2, 3, \dots).$$

Используя связь энергии электрона  $E$  с волновым вектором  $k$ , получить выражение для собственных значений энергии  $E_n$ .

12. Частица находится в потенциальном ящике. Найти отношение разности соседних энергетических уровней  $\Delta E_{n+1, n}$  к энергии  $E_n$  частицы в трех случаях: 1)  $n = 3$ , 2)  $n = 10$ , 3)  $n \rightarrow \infty$ .

13. Собственная функция, описывающая состояние частицы в потенциальном ящике, имеет вид  $\psi_n(x) = C_n \sin(\pi n/l)x$ . Используя условия нормировки, определить постоянную  $C_n$ .

14. Собственная функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид:

$$\psi(r) = Ce^{-r/a_0},$$

где  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m}$  – радиус первой боровской орбиты. Определить расстояние, на котором вероятность нахождения электрона максимальна.

15. Электрон в атоме водорода описывается в основном состоянии волновой функцией  $\psi(r) = Ce^{-r/a_0}$  ( $a_0$  – радиус первой боровской орбиты). Определить отношение вероятностей  $W_1/W_2$  пребывания электрона в сферических слоях толщиной  $\Delta r = 0.01a_0$ , радиусами  $r_1 = 0.5a_0$  и  $r_2 = 1.05a_0$ .

16. Атом водорода находится в основном состоянии. Вычислить: 1) вероятность  $W_1$  того, что электрон находится внутри области, ограниченной сферой радиуса  $a_0$ , равного радиусу первой боровской орбиты; 2) вероятность  $W_2$  того, что электрон находится вне этой области; 3) отношение вероятностей  $W_2/W_1$ . Волновую функцию считать известной:

$$\psi_{1,0,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} a_0^{-r/a_0}.$$

17. Зависящая от угла  $\phi$  угловая функция имеет вид  $\Phi(\phi) = Ce^{im\phi}$ . Используя условие нормировки, определить постоянную  $C$ .

### Экзаменационные вопросы

1. Теоретические аспекты квантовой химии. Волновая функция. Обобщённая координата.
2. Физический смысл волновой функции. Свойства волновой функции.
3. Основные постулаты квантовой механики.
4. Описание квантовомеханических величин с помощью операторов. Линейные операторы и их свойства.
5. Описание квантовомеханических величин с помощью операторов. Самосопряжённые операторы и их свойства.
6. Операторы основных физических величин: координаты, проекции импульса.
7. Операторы основных физических величин: кинетической и потенциальной энергии.
8. Гамильтониан.

9. Общее уравнение Шрёдингера.
10. Стационарное уравнение Шрёдингера.
11. Средние значения квантовомеханических величин.
12. Собственные значения и собственные функции.
13. Принцип суперпозиции. Принцип Паули.
14. Водородоподобные атомы. Решение уравнения Шрёдингера для одноэлектронных атомов.
15. Преобразование в сферических (полярных) координатах и разделение переменных.
16. Решение R-уравнения; полиномы Лягерра.
17. Главное, орбитальное, магнитное и спиновое квантовые числа.
18. Решение  $\Phi$ -уравнения. Решение  $\Theta$ -уравнения; полиномы Лежандра.
19. Угловая часть волновой функции.
20. Приближённые методы решения стационарного уравнения Шрёдингера
21. Численный расчёт полиномов Лягерра и Лежандра.
22. Атомные орбитали; радиальная и угловая часть.
23. Графическое представление радиальной и угловой части.
24. Графическое представление полной  $\Psi$ -функции.

## **7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

### **Основная литература:**

1. В. Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов. 3-е изд., испр. (эл.). М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. [www.studentlibrary.ru](http://www.studentlibrary.ru).
2. Ю.А. Байков, В.М. Кузнецов. Квантовая механика: учебное пособие. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996329892.html>.
3. Потапов А. А. Природа и механизмы связывания атомов: Монография. М.: ИЦ РИОР, НИЦ ИНФРА-М, 2016. <http://znanium.com/catalog.php>.

### **Дополнительная литература:**

1. Орлин Н.А. Строение атома и химическая связь: учебное пособие. 2-е изд., дополненное Владимир. 2010. <http://e.lib.vlsu.ru/handle/123456789/2108>.

### **Программное обеспечение и Интернет-ресурсы.**

1. Язык программирования Pascal.
2. Интегрированная среда разработки программ Borland Delphi.
3. <http://www.y10k.ru/books/> 4. <http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/fulltext.htm>
5. <http://www.sciencedirect.com>
6. <http://chemteq.ru/lib/book>
7. <http://www.chem.msu.su/rus>

## **8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

При чтении лекционного курса используются мультимедийные средства обучения в виде набора слайдов с демонстрацией через проектор.

На лабораторных занятиях используются компьютеры и соответствующее программное обеспечение.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению – 04.04.01 – “Химия” (магистратура), программа подготовки «Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность».

Рабочую программу составил доцент Лобко В.Н. *М*

Рецензент

*Научный сотрудник ООО "БМТ" Шрепеляков А.В.*

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 3/2 от 26.10 2015 г.

Заведующий кафедрой *Кухтис*

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 04.04.01 – “Химия” (магистратура)

Протокол № 3/2 от 28.10 2015 г.

Председатель комиссии *Кухтис*

Программа переутверждена:

на 2016/2017 учебный год. Протокол заседания кафедры № 2 от 5.09.16 года

Зав. кафедрой *Кухтис*

на 2017/2018 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1 от 30.08.17 года

Зав. кафедрой *Кухтис*

на \_\_\_\_\_ учебный год. Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

на \_\_\_\_\_ учебный год. Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

на \_\_\_\_\_ учебный год. Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_