

2019

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



Проректор по образовательной деятельности

А.А. Панфилов

« 03 » 09 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Направление подготовки – 04.04.01 – Химия

Профиль/программа подготовки – Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность

Уровень высшего образования: магистратура

Форма обучения – очная

Семестр	Трудоемкость зач. ед./ час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРС, час.	Форма промежуточной аттестации (экзамен/зачет/зачет с оценкой)
3	4/144	18			126	зачёт
Итого	4/144	18			126	зачёт

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель освоения дисциплины «Квантовая химия»: 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: 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.

Пререквизиты 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).

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП

Код формируемых компетенций	Уровень освоения компетенции ¹	Планируемые результаты обучения по дисциплине характеризующие этапы формирования компетенций (показатели освоения компетенции)
1	2	3
ОПК-1, ОПК-2, ПК-5	частичное	<p><i>Знать:</i> основные понятия квантовой механики, лежащие в основе квантовохимических представлений, суть математического описания стационарных молекулярных систем и методов решения соответствующего уравнения Шрёдингера, методы численного решения угловой и радиальной части уравнения Шрёдингера;</p> <p><i>Уметь:</i> профессионально пользоваться основными теоретическими понятиями квантовой химии, разбираться в основных методиках приближённого решения квантовомеханических задач;</p> <p><i>Владеть:</i> общетеоретической методикой квантовомеханического описания микромира, основами методик построения квантовохимического описания атомов и молекулярных систем, основными численными методами решения прикладных задач квантовой химии.</p>

4. ОБЪЕМ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоёмкость дисциплины составляет 4 зачётные единицы, 144 часа.

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем 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 текущего контроля, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы.	СРС		
1	Теоретические аспекты квантовой химии. Волновая функция. Физический смысл волновой функции.	3	1-3	2			10		
2	Описание квантовомеханических величин с помощью операторов.	3	4-6	4			10	2/50	
3	Операторы основных физических величин. Гамильтониан.	3	7-8	2			42	2/100	Рейтинг-контроль № 1
4	Уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера.	3	9-11	2			20	2/100	
5	Водородоподобные атомы. Уравнение Шрёдингера в сферических координатах.	3	12-14	4			18	3/75	Рейтинг-контроль. № 2
6	Решение R-уравнения. Решение Ф-уравнения. Решение Θ -уравнения.	3	15-16	2			18	1/50	
7	Численный расчёт радиальной и угловой функций и атомных орбиталей в целом для различных квантовых чисел	3	17-18	2			8		Рейтинг-контроль № 3

Всего за 3 семестр:			18			126	10/56	зачёт
Наличие в дисциплине КП/КР								
Итого по дисциплине			18			126	10/56	зачёт

Содержание лекционных занятий по дисциплине

Раздел I. Теоретические аспекты квантовой химии

Тема 1. Основные понятия квантовой химии

Содержание темы. 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.

Тема 2. Уравнение Шрёдингера

Содержание темы. Общее уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера. Средние значения квантовомеханических величин. Собственные значения и собственные функции. Принцип суперпозиции. Принцип Паули.

Раздел II. Квантовомеханическое описание строения одноэлектронных атомов

Тема 3. Водородоподобные атомы

Содержание темы. 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 Θ -уравнения; полиномы Лежандра. Угловая часть волновой функции.

Тема 4. Приближённые методы решения стационарного уравнения Шрёдингера

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

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В преподавании дисциплины «Квантовая химия» используются разнообразные образовательные технологии как традиционные, так и с применением активных и интерактивных методов обучения.

Активные и интерактивные методы обучения:

- *Интерактивная лекция (тема № 3);*
- *Групповая дискуссия (тема № 3, 4);*

- Анализ ситуаций (тема № 1, 3);
- Применение имитационных моделей (тема № 4);

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

Текущий контроль успеваемости приводится по результатам рейтинг-контроля по следующим контрольным вопросам:

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 Ф-уравнения.
7. Решение Θ -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?

Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины. Вопросы к зачёту

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 Ф-уравнения. Решение Θ -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 Ψ -функции.

Учебно-методическое обеспечение 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 β – коэффициент пропорциональности, x – смещение).

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

7. Чем обусловлено требование конечности ψ – 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 ψ – 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 ϕ угловая функция имеет вид $\Phi(\phi) = Ce^{im\phi}$. Используя условие нормировки, определить постоянную C .

Для успешного выполнения самостоятельной работы студентам рекомендуется следующая литература:

Кухтин Б.А., Лобко В.Н. Основы квантовой химии: учебное пособие. Издательство ВлГУ. 2002.

Фонд оценочных средств для проведения аттестации уровня сформированности компетенций обучающихся по дисциплине оформляется отдельным документом.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ	
		Количество экземпляров изданий в библиотеке ВлГУ в соответствии с ФГОС ВО	Наличие в электронной библиотеке ВлГУ
1	2	3	4
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.	2014	2	www.studentlibrary.ru
2. Ю.А. Байков, В.М. Кузнецов. Квантовая механика: учебное пособие. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015.	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.	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.	2010	10	http://e.lib.vlsu.ru/handle/123456789/2108

7.2. Периодические издания:

1. Журнал структурной химии.

7.3. Интернет-ресурсы.

1. <http://www.scirus.com/>
2. <http://www.ihtik.lib.ru/>
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. <http://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>
9. <http://www.elsevier.com/>
10. <http://www.uspkhim.ru/>
11. <http://www.strf.ru/database.aspx>

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для реализации данной дисциплины имеются специальные помещения для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

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

На лекциях используются наглядные пособия в виде моделей.

Перечень используемого лицензионного программного обеспечения: Windows 7, Microsoft Office 2010, Power Point, Adobe Reader,

Рабочую программу составил доцент Лобко В.Н.



Рецензент
(представитель работодателя)

АО «РМ НАНОТЕХ», начальник аналитического отдела центральной заводской лаборатории
к.х.н.



А.В. Третьяков

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 1 от 03.09 2019 г.

Заведующий кафедрой



Б.А.Кухтин

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии
направления 04.03.01 – «Химия»

Протокол № 1 от 03.09 2019 г.

Председатель комиссии



Б.А.Кухтин

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

в рабочую программу дисциплины

НАИМЕНОВАНИЕ

образовательной программы направления подготовки код и наименование ОП, направленность:
наименование (указать уровень подготовки)

Номер изменения	Внесены изменения в части/разделы рабочей программы	Исполнитель ФИО	Основание (номер и дата протокола заседания кафедры)
1			
2			

Зав. кафедрой _____ / _____
Подпись *ФИО*