

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)

Институт биологии и экологии

УТВЕРЖДАЮ:  
Директор института БиЭ  
Смирнова Н.Н.  
« 18 / 2021 г.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Квантовая химия**

**направление подготовки / специальность**

**04.04.01 Химия**

**направленность (профиль) подготовки**

**Химия окружающей среды, химическая экспертиза и  
экологическая безопасность**

г. Владимир

2021

## 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

Дисциплина «Квантовая химия» относится к части ОПОП, формируемой участниками образовательных отношений.

## 3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине, в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	
ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	ОПК-1.1. Знает теоретические основы в выбранной области химии или смежных наук; возможности современных программных продуктов в области баз данных профессионального назначения; ОПК-1.2. Умеет применять общенаучные познавательные принципы при организации, планировании и проведении научных исследований в области химии; выстраивать программу и выполнять научные исследования, обработку и анализ их результатов, формулировать выводы и рекомендации; анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений; ОПК-1.3. Владеет навыками теоретического обоснования своей позиции при проведении конкретной научно-	<i>Знать:</i> теоретические основы в выбранной области химии или смежных наук; возможности современных программных продуктов в области баз данных профессионального назначения <i>Уметь:</i> применять общенаучные познавательные принципы при организации, планировании и проведении научных исследований в области химии; выстраивать программу и выполнять научные исследования, обработку и анализ их результатов, формулировать выводы и рекомендации; анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений; <i>Владеть:</i> Владеет навыками теоретического обоснования	Вопросы, тестовые вопросы

	исследовательской работы, анализа собственной научной деятельности; способностью применения современных расчетно-теоретических методов в химии для решения профессиональных задач	своей позиции при проведении конкретной научно-исследовательской работы, анализа собственной научной деятельности; способностью применения современных расчетно-теоретических методов в химии для решения профессиональных задач	
ПК-2 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	<p>ОПК-2.1. Знает базовую терминологию, относящуюся к теоретическому описанию основных перспективных направлений развития методов обработки экспериментальных данных; методологию современных научных исследований;</p> <p>ОПК-2.2. Умеет ставить и формулировать задачи научных исследований на основе результатов поиска, обработки и анализа научно-технической информации; вести библиографическую работу с привлечением современных информационных технологий и зарубежных литературных источников;</p> <p>ОПК-2.3. Владеет способностью проводить критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их; навыками работы с современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработки результатов научных экспериментов, сборе, хранении, представлении и передаче научной информации</p>	<p><i>Знать:</i> базовую терминологию, относящуюся к теоретическому описанию основных перспективных направлений развития методов обработки экспериментальных данных; методологию современных научных исследований;</p> <p><i>Уметь:</i> ставить и формулировать задачи научных исследований на основе результатов поиска, обработки и анализа научно-технической информации; вести библиографическую работу с привлечением современных информационных технологий и зарубежных литературных источников;</p> <p><i>Владеть:</i> способностью проводить критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их; навыками работы с современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработки результатов научных экспериментов, сборе, хранении, представлении и передаче научной информации</p>	Вопросы, тестовые вопросы
ПК-5 Способен осуществлять научно-исследовательскую и профессиональную деятельность, связанную с экологической безопасностью, с использованием	<p>ПК-5.1 Знает правила охраны окружающей среды, методы проведения экологического мониторинга и экспертизы;</p> <p>ПК-5.2. Умеет разрабатывать схемы экспертных исследований; анализировать возможности различных методов, исходя из специфики поставленной исследовательской задачи и</p>	<p><i>Знать:</i> правила охраны окружающей среды, методы проведения экологического мониторинга и экспертизы;</p> <p><i>Уметь:</i> разрабатывать схемы экспертных исследований; анализировать возможности различных методов, исходя из специфики поставленной исследовательской задачи и</p>	

эффективных методик и методов химико-физического анализа	интерпретировать полученные результаты; ПК-5.3. Владеет методами выделения, идентификации и пробоподготовки для исследования объектов окружающей среды	интерпретировать полученные результаты; <i>Владеть:</i> методами выделения, идентификации и пробоподготовки для исследования объектов окружающей среды	
--	--	--	--

#### 4. ОБЪЕМ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часа.

##### Тематический план форма обучения – очная

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа обучающихся с педагогическим работником				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия <sup>1</sup>	Лабораторные работы	в форме практической подготовки <sup>2</sup>		
1	Теоретические аспекты квантовой химии. Волновая функция. Физический смысл волновой функции	3	1-3	2	2			8	
2	Описание квантовомеханических величин с помощью операторов	3	4-6	4	4			8	
3	Операторы основных физических величин. Гамильтониан.	3	7-8	2	2		2	38	1-й рейтинг-контроль
4	Уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера	3	9-11	2	2		2	18	
5	Водородоподобные атомы. Уравнение Шрёдингера в сферических координатах	3	12-14	4	4		4	14	2-й рейтинг-контроль
6	Решение R-уравнения. Решение Ф-уравнения. Решение Θ-уравнения	3	15-16	2	2		2	16	
7	Численный расчёт радиальной и угловой функций и атомных орбиталей в целом для различных квантовых чисел	3	17-18	2	2		2	6	3-й рейтинг-контроль
Всего за 1 семестр:			18	18	18			108	Зачет

<sup>1</sup> Распределение общего числа часов, указанных на практические занятия в УП, с учетом часов на КП/КР

<sup>2</sup> Данный пункт включается в рабочую программу только при формировании профессиональных компетенций.

Наличие в дисциплине КП/КР								
Итого по дисциплине			18	18			108	Зачет

### 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  $\Theta$ -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  $\Psi$ -функции. Программирование радиальной и угловой функций и атомных орбиталей в целом для различных квантовых чисел.

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

#### 5.1. Текущий контроль успеваемости

##### 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 перекрытия 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?

### **5.2. Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины**

#### *Контрольные вопросы для подготовки к зачету*

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  $\Theta$ -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.

### 5.3. Самостоятельная работа обучающегося.

*Контрольные вопросы для самостоятельного изучения:*

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 Шрёдингера 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:

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



где  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m}$  – радиус первой борховской 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 борховской 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 борховской 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  $C$ .

Фонд оценочных материалов (ФОМ) для проведения аттестации уровня сформированности компетенций обучающихся по дисциплине оформляется отдельным документом.

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 6.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ
		Наличие в электронном каталоге ЭБС
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 печ. экз. в библиотеке ВлГУ <a href="http://www.studentlibrary.ru">www.studentlibrary.ru</a>
2. Ю.А. Байков, В.М. Кузнецов. Квантовая механика: учебное пособие. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015.	2015	<a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN978_5996329892.html">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN978_5996329892.html</a>
3. Потапов А. А. Природа и механизмы связывания атомов: Монография. М.: ИЦ РИОР, НИЦ ИНФРА-М, 2016.	2016	<a href="http://znanium.com/catalog.php">http://znanium.com/catalog.php</a>
Дополнительная литература		
1. Орлин Н.А. Строение атома и химическая связь: учебное пособие. 2-е изд., дополненное Владимир. 2010.	2010	<a href="http://e.lib.vlsu.ru/handle/123456789/210">http://e.lib.vlsu.ru/handle/123456789/210</a> 10 печ. экз. в библиотеке ВлГУ

## 6.2. Периодические издания

1. Журнал структурной химии.

## 6.3. Интернет-ресурсы

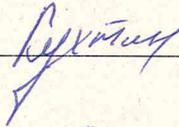
1. <http://www.scirus.com/>
2. <http://www.ihtik.lib.ru/>
3. <http://www.y10k.ru/books/>
4. <http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/fulltext.htm>
5. <http://www.sciencedirect.com>
6. <http://chemteq.ru/lib/book>
7. <http://www.chem.msu.su/rus>
8. <http://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>
9. <http://www.elsevier.com/>
10. <http://www.uspkhim.ru/>
11. <http://www.strf.ru/database.aspx>

## 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для реализации данной дисциплины имеются специальные помещения для проведения занятий лекционного и практического типов, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы.

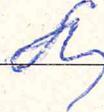
При чтении лекционного курса используются мультимедийные средства обучения в виде набора слайдов с демонстрацией через проектор. На лекциях используются наглядные пособия в виде моделей. Перечень используемого лицензионного программного обеспечения: Windows 7, Microsoft Office 2010, Power Point, Adobe Reader/

Рабочую программу составил

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_  Кухтин Б.А.

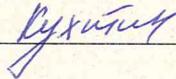
Рецензент

Генеральный директор ЗАО «БМТ»

К.т.н. \_\_\_\_\_  Поворов А.А.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

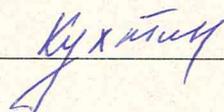
Протокол № 10 от 25.06.2021 года

Заведующий кафедрой химии \_\_\_\_\_  Кухтин Б.А.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена

на заседании учебно-методической комиссии направления 04.04.01 Химия

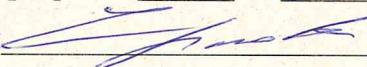
Протокол № 10 от 25.06.2021 года

Заведующий кафедрой химии \_\_\_\_\_  Кухтин Б.А.

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ  
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на 20 22 / 20 23 учебный года

Протокол заседания кафедры № 14 от 23.06.2022 года

Заведующий кафедрой  Н.Н. Смирнова

Рабочая программа одобрена на 20 \_\_\_\_ / 20 \_\_\_\_ учебный года

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_ от \_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Рабочая программа одобрена на 20 \_\_\_\_ / 20 \_\_\_\_ учебный года

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_ от \_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

**ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ**

в рабочую программу дисциплины

**"Квантовая химия"**

образовательной программы направления подготовки 04.04.01 "Химия", направленность:

*Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность*

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

Заведующий кафедрой химии \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_

*Подпись**ФИО*