

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета


А.С. Князев

«06» апреля 20 22 г.



Рабочая программа дисциплины

Квантовая химия

по направлению подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Химия»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Бакалавр

Год приема

2021

Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.08

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП


В.В. Шелковников

Председатель УМК


В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники.

– ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности.

ИОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.

ИОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности.

ИОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик.

ИОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить основы квантовой механики и квантовой химии;

– Получить представление об основах строения вещества, методах его экспериментального и теоретического изучения, взаимосвязи строения и свойств химических веществ;

– Научиться применять теоретические знания для решения конкретных задач в квантовой механике и квантовой химии; научиться применять полученные знания для анализа и прогноза свойств различных материалов и систем.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, является обязательной для изучения.

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 4, экзамен.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Математический анализ, Физика, Линейная алгебра и аналитическая геометрия.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

– лекции: 48 ч.;

– практические занятия: 32 ч.

в том числе практическая подготовка: 32 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Основные постулаты квантовой механики.

Предмет квантовой механики и квантовой химии, становление квантовой механики (эксперименты по спектрам газов и звезд, открытие корпускулярных свойств света, теория и постулаты Бора), волна де Бройля и ее свойства, вероятность местонахождения микрочастиц, принцип суперпозиции, принцип неопределенности, уравнение Шредингера.

Тема 2. Математический аппарат квантовой механики

Оператор, собственные функции. спектры операторов, свойства квантово-механических операторов, операторы координат, оператор импульса, оператор энергии, момент импульса, коммутаторы операторов, примеры коммутаторов, коммутационные соотношения, математические ожидания. средние значения, законы сохранения и стационарные состояния, представление волновой функции и операторов векторами и матрицами.

Тема 3. Одномерные задачи квантовой механики

Движение свободной частицы, электрон в потенциальной яме, двумерная бесконечная глубокая потенциальная яма, частица и одномерный потенциальный барьер, гармонический осциллятор.

Тема 4. Движение в поле центральной силы

Водородоподобный атом, квантовые числа, преобразование комплексных орбиталей в вещественные, графическое изображение орбиталей (радиальные функции, сферическая часть атомных орбиталей).

Тема 5. Электронное веретено

Данная тема включает такие вопросы как: опыт Штерна-Герлаха, волновая функция электрона с учетом спина, операторы спина, магнитные моменты

Тема 6. Ситуация со множеством электронов

Принцип тождественности микрочастиц, детерминант Слэтера, вариационные метод, вариационный метод Ритца, метод самосогласованного поля Хартри-Фока (метод Хартри, метод Хартри-Фока), классификация атомных состояний многоэлектронных атомов, электронные термы и конфигурации, гибридизация (гибридные атомные орбитали, типы гибридизации), периодический закон и квантовая механика (построение электронных оболочек элементов, периодичность состояний и других свойств).

Тема 7. Теория возмущений

Стационарная теория возмущений: случай отсутствия вырождения, Случай вырождения, эффект Штарка, эффект Зеемана.

Тема 8. Состояния молекул и уравнение Шредингера

Молекулярная структура, электронные, колебательные и вращательные состояния молекул, приближение Борна-Оппенгеймера, эффект Яна – Теллера, ион молекулы водорода с позиций квантовой механики, интегралы S и H.

Тема 9. Иерархия методов квантовой химии

Метод *ab initio*, вид аналитических базисных функций, базисные наборы, полуэмпирические методы, π -электронное приближение, метод Хюккеля, заряды на атомах, порядок связи, свободная валентность, расчет химических систем в π приближении Хюккеля, этилен, аллильный радикал.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения контрольных работ, выполнения домашних заданий и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

В 4 семестре проводится экзамен, состоящий из двух частей.

Первая часть включает выполнение домашних заданий и написания контрольных работ на положительную оценку («отлично», «хорошо», «удовлетворительно») в рамках семинарских занятий.

Вторая часть представляет собой экзамен в устной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух теоретических вопросов, проверяющих ИОПК-3.1., ИОПК-4.1, ИОПК-4.3.

1. Примерный перечень теоретических вопросов
2. Электрон – волна и частица: Волна Дэ Бройля.
3. Принцип суперпозиции (наложения) состояний.
4. Принцип неопределенности.
5. Уравнение Шредингера.
6. Оператор. Собственные функции. Спектры операторов. Свойства квантово-механических операторов.
7. Движение электрона в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
8. Частица и одномерный потенциальный барьер (туннельный эффект)
9. Гармонический осциллятор.
10. Квантовые числа и их физический смысл.
11. Вариационный метод Ритца.
12. Детерминант Слэтера.
13. Метод Хартри - Фока
14. Классификация атомных состояний многоэлектронных атомов.
15. Электронные термы и конфигурации.
16. Теория возмущений: стационарная теория возмущений
17. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.
18. Приближение Борна-Оппенгеймера.
19. Иерархия методов квантовой химии.
20. МЕТОД *ab initio*. Вид аналитических базисных функций.
21. Базисные наборы
22. π -электронное приближение
23. Метод Хюккеля.
24. Теория функционала плотности (ТФП).
25. Приближение локальной плотности (LDA)
26. Обобщенно-градиентное приближение (GGA).

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». Оценка «отлично» ставится в случае полного, развернутого ответа на вопросы в билете и на дополнительные вопросы по предмету. Оценка «хорошо» ставится при полном, развернутом ответе на вопросы в билете и неполных ответах на дополнительные вопросы. Оценка «удовлетворительно» ставится в случае полного ответа на вопросы в билете и ответы на не все дополнительные вопросы. Оценка «удовлетворительно» ставится в случае отсутствия ответов на вопросы.

11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=23520>
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
- в) План семинарских занятий по дисциплине.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
 - Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 1 : учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Изд-во Юрайт, 2016. – 233 с.
 - Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2 : учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Изд-во Юрайт, 2016. – 283 с.
 - Ефремов Ю. С. Квантовая механика : учебное пособие для вузов / Ефремов Ю.С. 2-е изд., испр. и доп.– М. : Изд-во Юрайт, 2018. – 458 с. - Университеты России.
 - Игнатов С. К. Квантовая химия. Ч. 1. Квантовая механика и строение атома : Курс лекций для студентов 2 курса дневного отделения химического факультета / С. К. Игнатов. – Нижний Новгород : Изд-во Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского, 2013. – 115 с. URL: <http://www.unn.ru/chem/ignatov/IgnatovSK-KvantovayaKhimiya-1.pdf>
 - Ермаков А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 1 : учебник и практикум для академического бакалавриата / А. И. Ермаков. – М. : Изд-во Юрайт, 2018. – 183 с.
 - Ермаков А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2 : учебник и практикум для академического бакалавриата / А. И. Ермаков. – М. : Изд-во Юрайт, 2018. – 402 с.
 - Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. Учебное пособие. / Д. И. Блохинцев – Изд. Наука. Изд. Шестое. 1983. – 664 с.
 - Унгер Ф. Г. Квантовая механика и квантовая химия, или введение в спиновую химию: Курс лекций / Ф. Г. Унгер. – Томск, ТГУ: ТМЛ-Пресс, 2010. – 312 с.

б) дополнительная литература:

- Строение атомных частиц. Водородоподобные атомы : [учебное пособие] / А. Я. Борщевский. – М. : Изд-во МГУ, 2010. – 86 с. URL : <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/borschevskii/1part.pdf>
- Барановский В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб.пособие для студ. высш. учеб. заведений / В. И. Барановский. – М. : Издательский центр «Академия», 2008. – 384 с.– Блатов В.А., Шевченко А.П., Пересыпкина Е.В. Полуэмпирические расчётные методы квантовой химии: Учебное пособие. Изд. 2-е. – Самара: Изд-во "Универс-групп", 2005. – 32 с. URL: <http://window.edu.ru/resource/556/63556>
- Кондрашин В.Ю. Квантовая механика и квантовая химия. Экспериментальные основы квантовой механики: Учебно-методическое пособие. - Воронеж: Изд-во ВГУ, 2005. – 51 с. URL: <http://window.edu.ru/resource/952/26952>

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
 - Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакетпрограмм. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (GoogleDocs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ –
<http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ –
<http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Меньщикова Татьяна Викторовна, канд. физ.-мат. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.