

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

Рабочая программа дисциплины

**Квантовая химия**

по направлению подготовки / специальности

**04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**

Направленность (профиль) подготовки / специализация:

**Фундаментальная и прикладная химия**

Форма обучения

**Очная**

Квалификация

**химик-специалист, преподаватель**

Год приема

**2023**

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

В.В. Шелковников

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

## **1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины**

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений в различных областях химии;

ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК 1.1 Знает теоретические основы неорганической, органической, физической и аналитической химии, применяет их при решении профессиональных задач в других областях химии.

РООПК 1.3 Умеет грамотно формулировать заключения и выводы по результатам работы.

РООПК 3.1 Знает основы теоретической физики, математического анализа и квантовой химии; основные теоретические и полуэмпирические модели, применяемые при решении задач химической направленности.

РООПК 3.2 Умеет решать расчетно-теоретические задачи химической направленности по разработанным методикам, использовать аппарат теоретической химии и физики для грамотной интерпретации полученных результатов.

## **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 Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

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

## **4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине**

Четвертый семестр, 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,  $\pi$ -электронное приближение, метод Хюккеля, заряды на атомах, порядок связи, свободная валентность, расчет химических систем в  $\pi$  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

Экзамен в четвертом семестре проводится в устной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух теоретических вопросов, проверяющих РООПК 1.3, РООПК 3.1.

Студент допускается к прохождению промежуточной аттестации при условии демонстрации практических навыков соответствующих РООПК 1.1, РООПК 3.1, РООПК 3.2 по всем темам курса.

Список вопросов:

1. Предмет квантовой механики и квантовой химии
2. Становление квантовой механики. (Включая эксперименты по спектрам газов и звезд. Открытие корпускулярных свойств света)
3. Теория и постулаты Бора.
4. Электрон – волна и частица: Волна Дэ Бройля.
5. Формула плоской волны.
6. Свойства волны Дэ Бройля.
7. Физический смысл волн Дэ Бройля.
8. Вероятностное рассмотрение электрона и микрочастиц. Физический смысл волновой функции.
9. Принцип суперпозиции (наложения) состояний.
10. Принцип неопределенности.
11. Уравнение Шредингера.
12. Оператор. Собственные функции. Спектры операторов.
13. Свойства квантово-механических операторов.
14. Операторы координат, импульса, энергии (гамильтониан).
15. Произведение векторов. Момент импульса: оператор момента импульса в декартовых и в сферических координатах. Собственные функции и собственные значения операторов  $\hat{M}_z$  и  $\hat{M}^2$ .
16. Критерий возможности одновременного измерения двух физических величин на языке операторов. Коммутаторы операторов.
17. Примеры коммутаторов, коммутационные соотношения.
18. Связь неопределенности при одновременном определении значений в случае не коммутирующих операторов. Математические ожидания. Средние значения.
19. Законы сохранения и стационарные состояния
20. Представление ВФ и операторов векторами и матрицами.
21. Движение свободной частицы
22. Движение электрона в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
23. Движение электрона в двумерной бесконечно глубокой потенциальной яме.
24. Частица и одномерный потенциальный барьер (туннельный эффект)
25. Гармонический осциллятор.
26. Водородоподобный атом.
27. Квантовые числа и их физический смысл.
28. Преобразование комплексных орбиталей в вещественные.
29. Графическое изображение орбиталей: Извероятностные поверхности. Радиальные функции. Сферические функции.
30. Опыт Штерна-Герлаха.
31. Операторы спина.
32. Волновая функция электрона с учетом спина.
33. Магнитные моменты.

34. Принцип тождественности микрочастиц (Оператор перестановки. Принцип антисимметрии.)
35. Вариационный метод.
36. Вариационный метод Ритца.
37. Детерминант Слэтера.
38. Метод Хартри.
39. Метод Хартри - Фока
40. Классификация атомных состояний многоэлектронных атомов.
41. Электронные термы и конфигурации.
42. Гибридные АО, типы гибридизации.
43. Построение электронных оболочек элементов.
44. Периодичность состояний и других свойств.
45. Теория возмущений: стационарная теория возмущений
46. Теория возмущений: случай отсутствия вырождения
47. Теория возмущений: случай вырождения
48. Молекулярная структура.
49. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.
50. Приближение Борна-Оппенгеймера.
51. Эффект Яна — Теллера.
52. Ион молекулы водорода с позиций квантовой механики.
53. Интегралы S и H. Связующие и разрыхляющие орбитали.
54. Иерархия методов квантовой химии.
55. МЕТОД abinitio. Вид аналитических базисных функций.
56. Базисные наборы
57. Полуэмпирические методы.
58.  $\pi$ -электронное приближение
59. Метод Хюккеля.
60. Порядки связей. Индекс свободной валентности. Заряды на атомах.
61. Расчет химических систем в  $\pi$  приближении Хюккеля: этилен
62. Расчет химических систем в  $\pi$  приближении Хюккеля: аллильный радикал

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.ru/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: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, 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.

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешенном формате («Актру»).

#### **15. Информация о разработчиках**

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