

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 31.10.2023 13:30:28
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»
(СПбГТИ(ТУ))**

УТВЕРЖДАЮ

**Проректор по учебной и
методической работе**

Б. В. Пекаревский

«10 » июля 2023 года

Рабочая программа дисциплины

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленности программы магистратуры

Все направленности

Квалификация

Магистр

Форма обучения

Очная

Факультет **информационных технологий и управления**

Кафедра **математики**

Санкт-Петербург

2023

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

| Должность | Подпись | Ученое звание, фамилия, инициалы |
|-------------|---------|-------------------------------------|
| Разработчик | | д.ф.-м.н. А. А. Груздков |

Рабочая программа дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» обсуждена на заседании кафедры математики

Протокол от «03» июля 2023 № 7

Заведующий кафедрой

А. А. Груздков

Одобрено учебно-методической комиссией факультета информационных технологий и управления

протокол от «05» июля 2023 № 10

Председатель

В. В. Куркина

СОГЛАСОВАНО

| | | |
|---|--|-------------------|
| Руководитель направления подготовки «Химия» | | С. Г. Изотова |
| Директор библиотеки | | Т. Н. Старостенко |
| Начальник методического отдела учебно-методического управления | | М. З. Труханович |
| Начальник УМУ | | С. Н. Денисенко |

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|----|
| 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы | |
| 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы | 4 |
| 3. Объем дисциплины..... | 6 |
| 4. Содержание дисциплины..... | 6 |
| 4.1. Разделы дисциплины и виды занятий | 6 |
| 4.2. Занятия лекционного типа | 7 |
| 4.3 Занятия семинарского типа | 7 |
| 4.4. Самостоятельная работа обучающихся..... | 8 |
| 5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине | 9 |
| 6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации | 9 |
| 7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины | 9 |
| 8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины | 9 |
| 9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины..... | 10 |
| 10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине | 10 |
| 10.1. Информационные технологии..... | 10 |
| 10.2. Программное обеспечение..... | 10 |
| 10.3. Базы данных и информационные справочные системы | 10 |
| 11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине | 10 |
| 12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья | 10 |
| Фонд оценочных средств | 11 |

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

| Код и наименование компетенции | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Планируемые результаты обучения (дескрипторы) |
|--|--|--|
| <p>ОПК-3 Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности</p> | <p>ОПК-3.2 Выполнение квантово-механических расчётов в области химии.</p> | <p>Знать: основные принципы и положения квантовой механики и квантовой химии (ЗН-1); методы решения классических задач квантовой механики (ЗН-2); принципиальные основы приближённых методов квантовой основы и квантовой химии (ЗН-3).</p> <p>Уметь: находить основные характеристики квантовых систем (У-1); применять приближённые методы решения задач квантовой механики (У-2).</p> <p>Владеть: навыками постановки задач квантовой механики и методами их решения (Н-1)</p> |

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы¹

Дисциплина относится к дисциплинам обязательной части. Код дисциплины по учебному плану Б1.О.05. Дисциплина изучается на 2 курсе в 3-м семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплины «Уравнения математической физики», «Физика твёрдого тела», а также разделов математики и физики, изученных в рамках программ бакалавриата.

Полученные в процессе изучения дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе и выполнении выпускной квалификационной работы.

¹ Место дисциплины будет учитываться при заполнении таблицы 1 в Приложении 1 (Фонд оценочных средств)

3. Объем дисциплины

| Вид учебной работы | Всего, академических часов |
|--|----------------------------------|
| | Очная форма обучения |
| Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов) | 3/108 |
| Контактная работа с преподавателем: | 56 |
| занятия лекционного типа | 18 |
| занятия семинарского типа, в т.ч. | 36 |
| семинары, практические занятия | 36 |
| лабораторные работы | |
| курсовое проектирование (КР или КП) | .. |
| КСР | 2 |
| другие виды контактной работы | .. |
| Самостоятельная работа | 52 |
| Контроль | |
| Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе) | 2 РГР |
| Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен) | Зачёт |

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

| № п/п | Наименование раздела дисциплины | Занятия лекционного типа, акад. часы | Занятия семинарского типа, академ. часы | | Самостоятельная работа, акад. часы | Формируемые компетенции/индикаторы |
|----------|--|---|---|------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|
| | | | Семинары и/или практические занятия | Лабораторные работы | | |
| 1. | Основные понятия и математический аппарат квантовой механики | 4 | 8 | | 10 | ОПК-3 ОПК-3.2 |
| 2. | Точно решаемые задачи квантовой механики. | 6 | 10 | | 10 | ОПК-3 ОПК-3.2 |
| 3. | Водородоподобные ионы | 4 | 10 | | 20 | ОПК-3 ОПК-3.2 |
| 4. | Приближённые методы квантовой | 4 | 8 | | 12 | ОПК-3 |

| | | | | | | |
|--|----------------------------|-----------|-----------|--|-----------|---------|
| | механики и квантовой химии | | | | | ОПК-3.2 |
| | ИТОГО | 18 | 36 | | 52 | |

4.2. Занятия лекционного типа

| № раздела дисциплины | Наименование темы и краткое содержание занятия | Объем, акад. часы | Инновационная форма |
|----------------------|---|-------------------|----------------------------|
| 1 | Проблемы описания экспериментально наблюдаемых явлений в рамках классической физики. Эрмитовы операторы в гильбертовом пространстве. Представление наблюдаемых самосопряжёнными операторами. Общий вид соотношения неопределённости Гейзенберга. Волновая механика Шрёдингера и подход Гейзенберга. | 4 | Групповая дискуссия |
| 2 | Стационарное уравнение Шрёдингера. Частица в «потенциальной яме», «туннельный эффект». Гармонический осциллятор, связь с проблемой теплоёмкости твёрдого тела. Учёт ангармонизма. Потенциалы межатомного взаимодействия. | 6 | Разбор конкретных ситуаций |
| 3 | Свойства оператора углового момента. Частица в сферически симметричном потенциальном поле. Уровни энергии дискретного и непрерывного спектра. Атомная система единиц. | 4 | |
| 4 | Метод Хартри-Фока. Метод функционала плотности. | 4 | |
| | Итого | 18 | |

4.3 Занятия семинарского типа

4.3.1. Семинары, практические занятия

| № раздела дисциплины | Наименование темы и краткое содержание занятия | Объем, акад. часы | Инновационная форма |
|----------------------|---|-------------------|---------------------|
| 1 | Понятие гильбертова пространства, примеры. Сопряжённые операторы. «Бра-кет» символика. Коммутатор операторов. | 4 | |
| 1 | Представление наблюдаемых операторами в гильбертовом пространстве. Среднее значение наблюдаемой и среднеквадратичное отклонение. Соотношение неопределённости. Эквивалентность подходов Шрёдингера и Гейзенберга. Чистые и смешанные состояния. | 4 | Мозговой штурм |
| 2 | Стационарное уравнение Шрёдингера. Стационарные состояния. Задача о частице в бесконечной потенциальной яме. Частица в конечной потенциальной яме. | 4 | |
| 2 | Гармонический осциллятор. Соответствие между квантовой и классической частицей. Проблема теплоёмкости твёрдого тела. Потенциал Морзе. | 4 | Групповая дискуссия |
| 2 | Преодоление барьера. Движение волнового пакета. | 2 | |

| № раздела дисциплины | Наименование темы и краткое содержание занятия | Объем, акад. часы | Инновационная форма |
|----------------------|---|-------------------|---------------------|
| 3 | Центр масс системы из двух частиц. Задача о частице в сферически симметричном потенциальном поле. Разделение переменных в уравнении Шрёдингера (в сферических координатах). | 6 | |
| 3 | Квантовые числа для водородоподобных ионов. Определение характеристик электрона в различных состояниях. | 4 | |
| 4 | Приближённые методы решения уравнения Шрёдингера. Метод Хартри и Хартри-Фока. | 4 | |
| 4 | Метод функционала плотности. | 4 | |
| | Итого | 36 | |

4.3.2. Лабораторные занятия

| № раздела дисциплины | Наименование темы и краткое содержание занятия | Объем, акад. часы | Примечание |
|----------------------|--|-------------------|------------|
| | не предусмотрены | | |

4.4. Самостоятельная работа обучающихся

| № раздела дисциплины | Перечень вопросов для самостоятельного изучения | Объем, акад. часы | Форма контроля |
|----------------------|---|-------------------|---------------------------|
| 1 | Ортогональность собственных функций самосопряжённых операторов. | 10 | Вопросы к зачёту |
| 2 | Нахождение уровней энергии и средних характеристик наблюдаемых для квантовой частицы. | 10 | РГР № 1, вопросы к зачёту |
| 3 | Определение средних значений характеристик электрона атома водорода в различных состояниях. | 20 | РГР № 2, вопросы к зачёту |
| 4 | Вариационные методы квантовой механики. | 12 | вопросы к зачёту |
| | Итого | 52 | |

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте Медиа: <http://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех индикаторов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачёта. К сдаче зачёта допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

Зачёт предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки знаний) и комплексная задача (для проверки умений и навыков).

При сдаче зачёта, студент получает два вопроса из перечня вопросов и одно практическое задание, время подготовки студента к устному ответу — до 45 мин.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) печатные издания:

1. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия: Учебное пособие для вузов по химическим спец. / В. И. Барановский. — М.: Academia, 2008. — 383 с.
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия: Учебное пособие для вузов по спец. ВПО 020101.65 «Химия» / А. И. Ермаков. — М.: Юрайт, 2010. — 555 с.
3. Мартинсон, Л. К. Квантовая физика : Учебное пособие для вузов по техническим направлениям и спец. / Л. К. Мартинсон, Е. В. Смирнов. — М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. — 527 с.

б) электронные учебные издания:

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 522 с. — ISBN 978-5-93208-518-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/172254> (дата обращения: 05.10.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул : учебное пособие / И. Майер ; художник Н. В. Зотова. — 4-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 387 с. — ISBN 978-5-93208-516-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/166732> (дата обращения: 05.10.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

учебный план, РПД и учебно-методические материалы: <http://media.technolog.edu.ru>
электронно-библиотечные системы:

- «Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;
«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Все виды занятий по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКВД. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 016-2015. КС УКВД. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходиться, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

10.1. Информационные технологии

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- взаимодействие с обучающимися посредством электронно-информационной образовательной среды.

10.2. Программное обеспечение

При выполнении РГР студенты используют пакет прикладных программ Mathcad.

10.3. Базы данных и информационные справочные системы

wolframalpha.com/examples/mathematics

11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для ведения лекционных и практических занятий используются аудитории кафедры математики.

При изучении соответствующих разделов курса используется компьютерный класс, оборудованный 16 персональными компьютерами, объединенными в сеть.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014 г.

Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия»

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

| Компетенции | | |
|--------------------|--|--------------------------------------|
| Индекс | Формулировка² | Этап формирования³ |
| ОПК-3 | Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности | промежуточный |

² **жирным шрифтом** выделена та часть компетенции, которая формируется в ходе изучения данной дисциплины (если компетенция осваивается полностью, то фрагменты)

³ этап формирования компетенции выбирается по п.2 РПД и учебному плану (начальный – если нет предшествующих дисциплин, итоговый – если нет последующих дисциплин (или компетенция не формируется в ходе практики или ГИА), промежуточный - все другие.)

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

| Код и наименование индикатора достижения компетенции | Показатели сформированности (дескрипторы) | Критерий оценивания | Уровни сформированности |
|--|---|--|--|
| ОПК-3.2 Выполнение квантово-механических расчётов в области химии. | Знает основные принципы и положения квантовой механики и квантовой химии (ЗН-1); | Ответы на вопросы №№ 1-10 к зачёту. | Демонстрирует правильное понимание основных понятий и принципов квантовой механики, допуская отдельные ошибки. |
| | Знает методы решения классических задач квантовой механики (ЗН-2); | Ответы на вопросы №№ 11-17 к зачёту. | Умеет решать классические задачи квантовой механики, допуская отдельные неточности и несущественные ошибки. |
| | Знает принципиальные основы приближённых методов квантовой основы и квантовой химии (ЗН-3). | Ответы на вопросы №№ 18-24 к зачёту. | Верно объяснять основные предположения и гипотезы, на которых базируются приближённые методы квантовой механики. |
| | Умеет находить основные характеристики квантовых систем (У-1); | Ответы на вопросы №№ 2-4 к зачёту. Выполнение РГР № 1 и РГР № 2. | Знает правила определения основных характеристики и правильно применяет их, допуская технические ошибки. |
| | Умеет применять приближённые методы решения задач квантовой механики (У-2). | Ответы на вопросы №№ 18-24 к зачёту. | Умеет ставить подбирать и обосновывать методы приближённого решения задач квантовой механики. |
| | Владеет навыками постановки задач квантовой механики и методами их решения (Н-1) | Ответы на вопросы №№ 11-12, 15-17 к зачёту. Выполнение РГР № 2. | Демонстрирует владение навыками постановки и решения задач, допуская отдельные ошибки. |

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

по дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачета, результат оценивания – «зачтено», «не зачтено».

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

3.1 Вопросы к зачёту

1. Линейные операторы в гильбертовом пространстве. Собственные значения операторов.
2. Самосопряжённые операторы, их основные свойства.
3. Связь между эрмитовыми операторами и измеряемыми значениями наблюдаемых.
4. Коммутирующие операторы. Коммутант операторов.
5. Соотношение неопределённости Гейзенберга.
6. Операторы импульса, кинетической энергии, потенциальной энергии, момента импульса.
7. Эволюция состояния. Представление Гейзенберга.
8. Временное и стационарное уравнение Шредингера.
9. Волновые функции. Свойства волновых функций одномерного уравнения Шредингера.
10. Матричное представление операторов.
11. Частица в «потенциальной яме».
12. Гармонический осциллятор. Уровни энергии и волновые функции.
13. Квантовое и классическое выражение для теплоёмкости системы гармонических осцилляторов.
14. Учёт ангармонизма. Потенциалы межатомного взаимодействия. Энергия диссоциации.
15. Атом водорода. Центр масс системы из двух частиц. Выражение для гамильтониана.
16. Разделение переменных в стационарном уравнении Шредингера для атома водорода.
17. Квантовые числа и волновые функции для водородоподобного иона.
18. Система невзаимодействующих тождественных частиц. Волновые функции бозонов и фермионов. Принцип Паули.
19. Одноэлектронное приближение.
20. Метод Хартри.
21. Метод Хартри-Фока.
22. Метод Хартри и Хартри-Фока для атома.
23. Метод молекулярных орбиталей.
24. Метод функционала плотности Кона-Шэма.

К зачёту допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче экзамена, студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше, и практическое задание, аналогичное заданиям расчётно-графических работ. Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 45 мин.

3.2 Содержание расчётно-графических работ (типовые варианты)

Расчётно-графическая работа № 1

1. Вычислите коммутатор операторов z и \hat{L}_x .
2. Определите среднее значение координаты x и проекции импульса p_x частицы,

состояние которой в некоторый момент времени определяется функцией

$$\psi(x) = A \exp(ikx - x^2/a^2).$$

3. Частица массой m находится в одномерном потенциальном поле

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq l, \\ U_0, & x \notin [0; l]. \end{cases}$$

Определите минимальное значение величины $l^2 U_0$, при котором появляется три дискретных уровня энергии.

Расчётно-графическая работа № 2

Для электрона атома водорода в состоянии $4p$:

1. Выпишите полную волновую функцию.
2. Постройте радиальную функцию плотности вероятности.
3. Найдите наиболее вероятное и среднее значение расстояния до ядра, а также среднеквадратичное отклонение для этой величины.

4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб

СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКВД. Порядок проведения зачетов и экзаменов.