

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«31» августа 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Основы квантовой механики

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Аналитическая химия, Биоорганическая химия, Высокомолекулярные соединения, Коллоидная химия, Лазерная химия, Медицинская химия и тонкий органический синтез, Нанобиоматериалы и нанобиотехнологии, Неорганическая химия, Нефтехимия, Органическая химия, Радиохимия, Физическая химия, Фундаментальная и прикладная энзимология, Химия ионных и молекулярных систем, Химическая кинетика, Химия высоких энергий, Химия и технология веществ и материалов, Химия твердого тела, Электрохимия

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №7 от 07.07.2021)

Москва 2021

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770.

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021, 2021/2022

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: базовая часть ООП, блок МЕН.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикаторы достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-2.С Способен в контексте профессиональной деятельности использовать знания об основных понятиях и методах естествознания	УК-2.С.1 Адекватно оценивает уровень естественнонаучной подготовки и необходимость повышения квалификации в соответствующей области знания	Владеть: навыками выделения физической составляющей, связанной со строением молекул, в химических задачах с последующим использованием стандартных подходов решения таких задач в физике
ОПК-4.С. Способен создавать математические модели профессиональных задач, учитывать ограничения и границы применимости моделей, интерпретировать полученные математические результаты	ОПК-4.С.1 Предлагает математические и (или) физические модели химических процессов	Знать: современные способы аналитического описания структурных характеристик и энергетических свойств молекулярных систем, возможности описания колебательных и вращательных состояний молекул на примере модельных систем (гармонический осциллятор, жесткий ротатор и др.), ограничения используемых современных моделей строения молекул
	ОПК-4.С.2 Грамотно интерпретирует математические результаты расчета характеристик (свойств, параметров) химических объектов	Уметь: решать простейшие квантово-механические задачи Владеть: навыками поиска недостающей информации и ее анализа, существующими стандартными методами расчетными методами, используемыми при решении квантовомеханических задач
ОПК-5.С. Способен использовать современные расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием при решении профессиональных задач	ОПК-5.С.1. Оценивает свойства веществ и материалов, прогнозирует результаты химических процессов с использованием современных расчетно-теоретических методов и представлений	Уметь: предложить способы теоретического описания основных свойств молекулярных систем
ОПК-6.С. Способен использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области физики и математики	ОПК-6.С.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности	Знать: базовые положения, на основе которых развиваются представления и создаются модели современной химии Владеть: навыками использования качественных и количественных методов квантовой механики при рассмотрении простейших атомных и молекулярных задач Знать: особенности квантовомеханических представлений, их взаимосвязь с представлениями других разделов теоретической физики и теоретической химии

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единиц, всего 108 часов, из которых 78 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 36 часов занятия семинарского типа, 2 часа - групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 30 часа составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: основы теоретической механики

Уметь: решать задачи курса теоретической механики

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Постулаты и основы математического аппарата квантовой механики		12	6				18			
Тема 2. Приближённые методы квантовой механики		6	20				26			

Промежуточная КР			2(*)			КР на лекции	2			
Тема 3. Заряженные частицы в электромагнитном поле		8	4				12			
Тема 4. Системы тождественных частиц		5	2				7			
Тема 5. Теория рассеяния		5	-				5			
Рубежная КР			2(*)			КР на лекции	2			
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>				2		4	6			30
Итого	108	36	36	4		4	78			30

Содержание лекций

Постулаты и основы математического аппарата квантовой механики	Предмет квантовой механики. Основные этапы развития квантовой теории. Связь с представлениями классической механики. Главные тенденции в развитии квантовомеханических представлений применительно к формированию теоретических представлений современной химии. Основные постулаты квантовой механики. Квантовые состояния и волновые функции. Основные требования к волновым функциям. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве и нормировка волновых функций
	Эволюция состояний и временное уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера. Дискретный и непрерывный спектры. Уравнение непрерывности. Системы с непрерывным энергетическим спектром. Нормировка волновых функций
	Задача об атоме водорода. Разделение переменных. Дискретный спектр. Качественный характер радиальной и угловой частей волновой функции. <i>s</i> -, <i>p</i> - и <i>d</i> -функции. Вырождение электронных состояний как следствие симметрии центрального поля.
Приближённые методы квантовой механики	Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод. Метод Ритца. Теория возмущений Релея – Шрёдингера для дискретного спектра в отсутствие и при наличии вырождения. Временная теория возмущений
Заряженные частицы в	Заряженная частица в однородном электрическом и магнитном полях. Дипольный электрический и магнит-

электромагнитном поле	ный моменты системы частиц. Эффекты Штарка и Зеемана. Квантовая система в электромагнитном поле. Спонтанные и вынужденные переходы. Комбинационное рассеяние излучения. Коэффициенты Эйнштейна
	Эволюция волнового пакета. Основные представления квантовой динамики. Спин и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения для них. Сложение спинов. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления
Системы тождественных частиц	Перестановочная симметрия волновых функций системы тождественных частиц. Бозоны и фермионы. Антисимметричность волновой функции системы электронов. Представление волновой функции в виде определителя
Теория рассеяния	Общая теория рассеяния. Теория упругих и неупругих столкновений. Понятие о релятивистской квантовой механике. Волновые уравнения Клейна – Гордона и Дирака

Содержание семинаров

Постулаты и основы математического аппарата квантовой механики	Операторы физических величин (наблюдаемых) в квантовой механике, средние значения и дисперсии наблюдаемых. Линейные, эрмитовы (симметричные) и унитарные (ортогональные) операторы. Собственные функции и собственные значения операторов. Матричное представление операторов
	Операторы координат, импульсов, момента импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Коммутационные соотношения для операторов. Соотношения неопределенностей
Простейшие примеры применений квантовой механики	Простейшие примеры применения квантовой механики. Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций. Задачи о прямоугольном потенциальном ящике, потенциальном барьере и гармоническом осцилляторе
	Контрольная работа (промежуточная)
	Теория момента импульса (углового момента) Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса. Собственные значения операторов квадрата и одной из проекций момента импульса
	Простейшие случаи матричного представления операторов углового момента. Правила сложения моментов импульса. Жесткий ротатор
Заряженные частицы в электромагнитном поле	Задача об атоме водорода.
	Заряженная частица в однородном электрическом и магнитном полях. Дипольный электрический и магнитный моменты системы частиц. Эффекты Штарка и Зеемана. Квантовая система в электромагнитном поле. Спонтанные и вынужденные переходы. Комбинационное рассеяние излучения. Коэффициенты Эйнштейна

Системы тождественных частиц	Бозоны и фермионы. Антисимметричность волновой функции системы электронов.
	Контрольная работа (рубежная)

5. Образовательные технологии:

- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

6. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

7. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

- В. В. Балашов, В. К. Долинов Курс квантовой механики, 2-е изд., Ижевск. 2001
- А. Боум Квантовая механика: основы и приложения, «Мир», 1990
- Л. А. Головань, Е. А. Константинова, П. А. Форш Задачи по квантовой механике для химиков. М.: Физ. Ф-т МГУ. 2010
- П. В. Елютин, В. Д. Кривченков Квантовая механика с задачами. Физматлит. 2001
- К. А. Казаков. Введение в теоретическую и квантовую механику. Изд-во МГУ, физ. Ф-т. 2008
- Н. В. Карлов, Н. А. Кириченко Начальные главы квантовой механики М.: Физматлит. 2004. 360 с.
- Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц Квантовая механика Нерелятивистская теория (Теоретическая физика. Т. 3) Переиздания последних лет.
- Н. Ф. Степанов Квантовая механика и квантовая химия. М.: «Мир». 2001. 519 с.
- Ермаков А. И. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ. В 2 Ч. Юрайт. 2021 г.

Дополнительная литература

- А. Ярив Введение в теорию и приложения квантовой механики. М.: «Мир». 1984

8. Язык преподавания – русский

9. Преподаватели: доктор физико-математических наук, проф. Константинова Е.А.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Примеры вопросов для экзамена:

1. Постулаты квантовой механики.

Задание: найти коммутационное соотношение для пар операторов.

2. Математический аппарат квантовой механики.

Задание: выписать оператор Гамильтона для заданного атома.

3. Теория момента количества движения в квантовой механике.

Задание: выписать оператор Гамильтона для заданной двухатомной молекулы.

4. Матричное представление операторов. Спин и матрицы Паули

Задание: привести простейшие примеры использования теории возмущений (в матричном представлении).

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать: современные способы аналитического описания структурных характеристик и энергетических свойств молекулярных систем, возможности описания колебательных и вращательных состояний молекул на примере модельных систем (гармонический осциллятор, жесткий ротатор и др.), ограничения используемых современных моделей строения молекул</p> <p>Знать: базовые положения, на основе которых развиваются представления и создаются модели современной химии.</p> <p>Знать: особенности квантовомеханических представлений, их взаимосвязь с представлениями других разделов теоретической физики и теоретической химии</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<p>Уметь: решать простейшие квантово-механические задачи</p> <p>Уметь: предложить способы теоретического описания основных свойств молекулярных систем</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<p>Владеть: навыками выделения физической составляющей, связанной со строением молекул, в химических задачах с последующим использованием стандартных подходов решения таких задач в физике</p> <p>Владеть: навыками поиска недостающей информации и ее анализа, существующими стандартными методами расчетными методами, используемыми при решении квантовомеханических задач</p> <p>Владеть: навыками использования качественных и количественных методов квантовой механики при рассмотрении простейших атомных и молекулярных задач</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>