

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

УТВЕРЖДАЮ

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



/С.Н. Калмыков/

«20» мая 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 №5 от 19.05.2021)

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 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019).

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 при мере 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

<p>ОПК-6.С. Способен использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области физики и математики</p>	<p>ОПК-6.С.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности</p>	<p>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</p>
---	---	---

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.

<p>Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)</p>	<p>Всего (часы)</p>	<p>В том числе</p>	
		<p>Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них</p>	<p>Самостоятельная работа обучающегося, часы из них</p>

		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		10	4				14			
Тема 2. Одномерные модельные задачи квантовой механики		8	12			(*)	20			
Тема 3. Трёхмерные модельные задачи квантовой механики		8	12				20			
Тема 4. Спин частиц, системы тождественных частиц		5	4				9			
Тема 5. Приближенные методы квантовой механики		5	4			(*)	9			
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>				2		4	6			30
Итого	108	36	36	4		4	78			30

(*) текущий контроль на семинарских занятиях (контрольные работы)

Содержание лекций

Постулаты и основы математического аппарата	Предмет квантовой механики. Необходимость знания основных задач квантовой механики для изучения курса «Квантовая химия и строение молекул». Связь с представлениями классической механики. Основные
---	---

квантовой механики	постулаты классической механики и квантовой механики. Квантовые состояния и функции состояний (волновые функции). Основные требования к волновым функциям. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве и нормировка волновых функций. Наблюдаемые, средние и точные значения.
	Эволюция состояний и временное уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера. Дискретный и непрерывный спектры.
	Принцип неопределенности и соотношение неопределенностей.
Одномерные модельные задачи квантовой механики	Спектр энергии, качественные особенности волновых функций. Частицы в ямах, линейный гармонический осциллятор, осциллятор Морзе, туннелирование частиц.
Трёхмерные модельные задачи квантовой механики	Разделение переменных. Трёхмерный гармонический осциллятор. Теория момента импульса.
	Задача об атоме водорода. Разделение переменных. Дискретный спектр. Качественный характер радиальной и угловой частей волновой функции.
Спин частиц и системы тождественных частиц	Спин частиц. Операторы спина и коммутационные соотношения для них. Сложение спинов. Перестановочная симметрия волновых функций системы тождественных частиц. Бозоны и фермионы. Антисимметричность волновой функции системы электронов. Формализм спина электрона.
Приближённые методы квантовой механики	Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод решения задач. Теория возмущений для дискретного спектра энергии. Временная теория возмущений.

Содержание семинаров

Постулаты и основы математического аппарата квантовой механики	Операторы физических величин (наблюдаемых) в квантовой механике, средние значения и дисперсии наблюдаемых. Линейные, эрмитовы операторы. Собственные функции и собственные значения операторов. Матричное представление операторов на примере операторов спина.
	Операторы координат, импульсов, момента импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Коммутационные соотношения для операторов. Соотношения неопределенностей.
	Простейшие примеры применения квантовой механики. Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций. Задачи о прямоугольном потенциальном ящике, потенциальном барьере и гармоническом осцилляторе.
Простейшие примеры применений квантовой механики	Контрольная работа (промежуточная)
	Трёхмерные задачи. Теория момента импульса (углового момента) Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса. Собственные значения операторов квадрата и одной из про-

	екций момента импульса.
	Правила сложения моментов импульса.
	Задача об одноэлектронном атоме.
Спин частиц и системы тождественных частиц	Аппарат спина электрона. Тождественные частицы. Свойства перестановочной симметрии функций состояния. Многоэлектронные функции состояния.
Приближённые методы квантовой механики	Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод решения задач. Теория возмущений для дискретного спектра энергии. Временная теория возмущений.
	Контрольная работа (рубежная)

6. Образовательные технологии:

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

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

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

- К. А. Казаков. Введение в теоретическую и квантовую механику. Изд-во МГУ, физ. Ф-т. 2008
- Л. А. Головань, Е. А. Константинова, П. А. Форш. Задачи по квантовой механике для химиков. М.: Физ. Ф-т МГУ. 2010
- Н. Ф. Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. М.: «Мир». 2001. 519 с.
- А.В. Немухин, А.А. Бучаченко, Б.Л.Григоренко. Конспект лекций по квантовой механике для химиков, 2021
- 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
- Л.Д.Ландау, Е.М. Лифшиц Теоретическая физика Т.3. Квантовая механика (нерелятивистская теория). Издательство "Физматлит", 5-е изд., стер., 2001, 808 с.

Материально-техническое обеспечение – занятия проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций

9. **Язык преподавания** – русский

10. **Преподаватели:** лектор – проф. А.В. Немухин,

семинаристы: А.С.Белов, И.О.Глебов, Е.Д.Белега, Е.А.Бормотова, А.Ю.Ермилов, Д.П.Капуста, Д.В.Хохлов, Д.Н.Чистиков, С.В.Козлов

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 заданий контрольных работ:

- 1) Вычислить результат коммутации операторов координаты и кинетической энергии.
- 2) Предложить решение задачи о частице в прямоугольной потенциальной яме с одной конечной и одной бесконечной стенками.
- 3) Вычислить среднее значение силы, действующий на линейный гармонический осциллятор в первом возбужденном состоянии.
- 4) Решить задачу двумерного изотропного гармонического осциллятора.
- 5) Выразить компоненты оператора момента импульса в сферических координатах.
- 6) Определить вероятности измерения проекции момента импульса с заданной волновой функцией.
- 7) Предложить способ расчета колебательных уровней энергии осциллятора Морзе линейным вариационным методом.

Примеры вопросов к экзамену:

- 1) Вывести соотношение неопределенностей для проекций момента импульса.
- 2) Описать ход решения задачи линейного гармонического осциллятора.
- 3) Доказать теоремы о собственных функциях и собственных значениях эрмитовых операторов.
- 4) Построить графики радиальных волновых функций одноэлектронного атома.
- 5) Доказать основную лемму вариационного метода решения задач дискретного спектра энергии.
- 6) Вывести формулу для собственных значений оператора проекции момента импульса.
- 7) Обосновать вид матриц для оператора спина электрона.

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 при мере 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>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
<p>Уметь: решать простейшие квантово-механические задачи</p> <p>Уметь: предложить способы теоретического описания основных свойств молекулярных систем</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
<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</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене

методами расчетными методами, используемыми при решении квантовомеханических задач Владеть: навыками использования качественных и количественных методов квантовой механики при рассмотрении простейших атомных и молекулярных задач	
--	--