

УТВЕРЖДАЮ  
Первый проректор, проректор по  
УР

\_\_\_\_\_ А.Е. Рудин

«04» \_\_\_\_ 04 \_\_\_\_ 2023 года

## Рабочая программа дисциплины

**Б1.О.31** Квантовая химия

Учебный план: 2024-2025 04.05.01 ИПХЭ Медицинская химия ОО №3-1-155.plx

Кафедра: **44** Теоретической и прикладной химии

Направление подготовки:  
(специальность) 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Профиль подготовки: специализация "Медицинская химия"  
(специализация)

Уровень образования: специалитет

Форма обучения: очная

### План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)		Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоёмкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
		Лекции	Практ. занятия				
8	УП	51	34	32	27	4	Экзамен
	РПД	51	34	32	27	4	
Итого	УП	51	34	32	27	4	
	РПД	51	34	32	27	4	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденным приказом Минобрнауки России от 13.07.2017 г. № 652

Составитель (и):

д.х.н., Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_

Новоселов Николай  
Петрович

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой теоретической и прикладной химии

\_\_\_\_\_

Новоселов Николай  
Петрович

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_

Новоселов Николай  
Петрович

Методический отдел:

\_\_\_\_\_

## 1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

**1.1 Цель дисциплины:** формирование компетенций у студентов в области квантовой механики и квантовой химии, способствующей становлению их готовности к решению задач профессиональной деятельности

### 1.2 Задачи дисциплины:

- раскрыть основные постулаты и принципы квантовой механики и квантовой химии;
- изучить математический аппарат квантовой механики и квантовой химии;
- изучить основные приближенные методы решения квантовомеханических задач;
- подготовить студентов к активному использованию приобретенных знаний и умений в области квантовой механики и квантовой химии как при изучении смежных учебных модулей подготовки специалиста, так и в своей дальнейшей профессиональной деятельности.

### 1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

Информационные технологии в научной деятельности

Строение вещества

Физика

Вычислительные методы в химии

Физическая химия

Физические методы исследования в химии

Математика

Информационные технологии

## 2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

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

**Знать:** основные постулаты и принципы квантовой механики и квантовой химии

**Уметь:** использовать основные приближенные методы при решении квантово-механических задач

**Владеть:** навыками квантово-механических и квантово-химических расчетов

**ОПК-5: Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности**

**Знать:** возможности программного обеспечения для создания баз данных с целью описания квантово-механической модели молекул и веществ

**Уметь:** использовать стандартные и специализированные программы для хранения и обработки данных и для квантово-механических расчетов

**Владеть:** навыками использования программного обеспечения для обработки данных и для квантово-механических расчетов

### 3 РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Инновац. формы занятий	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Пр. (часы)			
Раздел 1. Исходные положения квантовой механики	8					,3
<p>Тема 1. Волновая функция, ее основные свойства и принцип суперпозиции состояний. Кризис классической физики на рубеже XIX-XX вв. и исторические предпосылки появления квантовой механики и квантовой химии. Неустойчивость атома в классической планетарной модели. Дифракция электронов. Корпускулярно- волновой дуализм микроскопических объектов. Неопределенность понятия траектории в квантовой механике, отсутствие классической связи между координатой и импульсом частицы. Понятие измерения и прибора. Причины и следствия менее подробного квантовомеханического описания в сравнении с классическим. Кванты, постоянная Планка и соотношения Планка.</p> <p>Понятие волновой функции или вектора состояния в абстрактном гильбертовом пространстве. Волновая функция как комплексная, однозначная и непрерывная функция своих аргументов. Координатное и импульсное представления, конфигурационное пространство. Волновая функция свободно движущейся частицы. Описание свободного движения частицы с определенным значением импульса, плоская волна де Бройля</p> <p>Статистическое толкование волновой функции. Условие нормировки и ее физический смысл, нормированные волновые функции. Плотность вероятности и ее связь с нормированными волновыми функциями. Неоднозначность нормированных волновых функций, фазовый множитель. Волновые функции не допускающие нормировки. Волновые функции свободной частицы в неограниченном объеме пространства как пример ненормируемых волновых функций.</p> <p>Принцип суперпозиции состояний. Два утверждения, лежащие в основе принципа суперпозиции состояний. Сравнительный анализ суперпозиции состояний в квантовой механике и суперпозиции колебаний в классической физике. Возможность существования состояний с неопределенными значениями физических величин как следствие принципа суперпозиции.</p> <p>Свободная частица в ограниченном объеме пространства. Периодические условия или условия Борна-Кармана. Квантование волновых чисел. Представление произвольной волновой функции как разложение по полному набору базисных функций. Скалярное произведение волновых функций, понятие ортогональности волновых функций. Процедура вычисления коэффициентов разложения, физический смысл этих коэффициентов и связь между ними как следствие условия нормировки.</p> <p>Практическое занятие: Волновая функция, ее основные свойства и принцип суперпозиции состояний</p>		8	4	3		

<p>Тема 2. Операторы физических величин. Вычисление средних значений координаты и импульса. Операторы физических величин. Линейные операторы и их свойства. Понятие эрмитовых или самосопряженных операторов. Понятие коммутатора операторов. Условие, при котором произведение самосопряженных операторов является самосопряженным оператором. Оператор углового момента и оператор энергии в нерелятивистском приближении. Вывод различных перестановочных соотношений. Собственные функции и собственные значения операторов. Задача Штурма-Лиувилля. Спектр оператора, понятие дискретного и непрерывного спектров, квантовые числа. Вычисление собственных значений и собственных функций операторов. Свойства собственных функций операторов, имеющих дискретный спектр. Физический смысл ортогональности собственных функций. Свойства собственных функций при наличии вырождения, процедура ортогонализации. Условие полноты собственных функций. Свойства собственных функций операторов, имеющих непрерывный спектр. Нормировка на дельта-функцию. Практическое занятие: Операторы физических величин</p>	8	4	3			
<p>Тема 3. Принцип неопределенности Гейзенберга. Условия, при которых несколько физических величин могут иметь определенные значения в одном состоянии. Прямая и обратная теоремы. Примеры. Соотношение неопределенностей для физических величин и его отрицательное содержание. Различные формы соотношения Гейзенберга, канонически сопряженные величины в классической механике и дополнительные величины в квантовой механике. Принцип дополнительности Бора. Практическое занятие: Принцип неопределенности Гейзенберга</p>	4	4	3			

<p>Тема 4. Волновое и стационарное уравнения Шредингера  Волновое уравнение Шредингера. Оператор Гамильтона, принцип причинности. Связь уравнения Шредингера с уравнением Гамильтона-Якоби. Сохранение нормировки волновой функции с течением времени. Уравнение Шредингера как уравнение непрерывности, плотность вероятности и вектор плотности тока вероятности. Понятие редукции волнового пакета.  Стационарные состояния. Стационарное уравнение Шредингера как задача Штурма-Лиувилля. Свойства стационарных состояний.  Предельный переход от квантовой механики к классической. Уравнение Гамильтона-Якоби и функция действия. Три условия предельного перехода. Квазиклассическое приближение (метод Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна).  Правило квантования Бора-Зоммерфельда и условие его применимости.  Использование правила квантования Бора-Зоммерфельда для приближенного расчета уровней гармонического осциллятора.  Прохождение частицы через потенциальный барьер. Движение частицы над потенциальным барьером и потенциальной ямой. Коэффициенты прохождения и отражения.  Гармонический осциллятор. Уровни энергии гармонического осциллятора. Трехмерный гармонический осциллятор.  Практическое занятие: Волновое и стационарное уравнения Шредингера</p>		12	6	6	ГД	
<p>Раздел 2. Движение частиц в сферически симметричных полях</p>						
<p>Тема 5. Общие особенности движения частицы в поле сферической симметрии. Свободное движение с определенным значением орбитального момента. Частный случай s- состояния. Эффективная потенциальная энергия. Движение в сферически симметричной прямоугольной потенциальной яме.  Практическое занятие: Движение частиц в сферически симметричных полях</p>		4	4	3		,3
<p>Тема 6. Движение в кулоновском поле. Случай дискретного спектра. Случай непрерывного спектра. Радиальные волновые функции водорода. Атомные орбитали водородоподобного атома.</p>		4		4	ГД	
<p>Раздел 3. Приближенные методы квантовой химии</p>						
<p>Тема 7. Приближенные методы Хартри-Фока и Томаса-Ферми  Метод Хартри. Самосогласованное поле Хартри. Метод Хартри-Фока. Примеры расчетов  Практическое занятие: Приближенные методы квантовой химии</p>		4	4	3		,3

Тема 8. Статистический метод Томаса-Ферми. Уравнение Томаса-Ферми в безразмерных переменных. Применение метода Томаса-Ферми к нейтральным атомам и ионам Практическое занятие: Ансамбли квантовых частиц и методы их описания	4	4	3		
Тема 9. Полные орбитальные и спиновые квантовые числа. Спин-орбитальное взаимодействие. Квантовое число полного момента. Термы многоэлектронных атомов. Термы в приближении LS-связи. Перспективы развития квантовой химии. Практическое занятие: Приближенные	3	4	4	ГД	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)	51	34	32		
Консультации и промежуточная аттестация (Экзамен)	2,5		24,5		
<b>Всего контактная работа и СР по дисциплине</b>		87,5	56,5		

#### 4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

#### 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

##### 5.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

##### 5.1.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
ОПК-4	<p>Формулирует основные постулаты и принципы квантовой механики и квантовой химии.</p> <p>Применяет знание волновой теории для решения квантово-механической задачи.</p> <p>Решает квантово-механические задачи.</p>	<p>Вопросы для устного собеседования</p> <p>Практико-ориентированные задания</p>
ОПК-5	<p>Описывает процесс оценки возможностей программного обеспечения для создания баз данных с целью описания квантово-механической модели молекул и веществ</p> <p>Применяет ПО для хранения и обработки квантово-механических расчетов</p> <p>Анализирует ПО с целью проведения квантово-механических расчетов</p>	<p>Вопросы для устного собеседования</p> <p>Практико-ориентированные задания</p>

##### 5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
5 (отлично)	<p>Полный исчерпывающий ответ, показывающий понимание предмета. Ориентируется в основных терминах, знаком с дополнительной литературой, правильно отвечает на дополнительные вопросы.</p> <p>Студент показывает правильное понимание условия задачи, владеет навыками выбора нужных законов для ее решения.</p>	
4 (хорошо)	<p>Стандартный ответ, лишенный индивидуальности. Допускает незначительные погрешности при ответе на вопросы.</p>	

	<p>Студент показывает достаточное понимание условия задачи, путается в выборе нужных законов и формул для ее решения.</p> <p>Неполный ответ, имеют место небольшие пробелы в знаниях. Допускает погрешности при ответе на вопросы.</p> <p>Студент показывает достаточное понимание условия задачи, путается в выборе нужных законов для ее решения.</p>	
3 (удовлетворительно)	<p>Показывает знания учебного материала в минимальном объеме. Допускает большое количество непринципиальных ошибок. Может устранить их с помощью преподавателя.</p> <p>Студент показывает недостаточное понимание условия задачи, путается в выборе нужных законов для ее решения.</p> <p>Неполный ответ, есть ошибки в изложении нескольких тем. Путается в терминах.</p>	
2 (неудовлетворительно)	<p>Не может ответить на вопрос без помощи экзаменатора. Многочисленные грубые ошибки.</p> <p>Не понимает условие задачи, не может предложить варианты решения.</p> <p>Непонимание заданного вопроса.</p> <p>Не понимает условие задачи, не может предложить варианты ее решения.</p> <p>Попытка списывания, использования неразрешенных технических устройств или пользование подсказкой другого человека.</p>	

## 5.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

### 5.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 8	
1	Исторические предпосылки появления квантовой механики и квантовой химии.
2	Понятие волновой функции. Волновая функция свободно движущейся частицы и ее свойства.
3	Принцип неопределенности и его отрицательное содержание. Принцип суперпозиции. Базис.
4	Статистическое толкование волновой функции. Условие нормировки. Плотность вероятности.
5	Свободная частица в ограниченном объеме пространства. Условие Борна-Кармана. Квантование волновых чисел.
6	Вычисление средних значений координаты и импульса. Среднее значение кинетической энергии частицы.
7	Операторы физических величин. Собственные числа и собственные функции операторов.
8	Операторы координаты, импульса, энергии и углового момента.
9	Коммутатор операторов. Условие, при котором произведение эрмитовых операторов является самосопряженным оператором.
10	Свойства собственных функций операторов, имеющих дискретный спектр.
11	Условия, при которых несколько физических величин могут иметь определенные значения в одном состоянии.
12	Соотношение неопределенности для физических величин.
13	Волновое уравнение Шредингера. Оператор Гамильтона и его смысл. Принцип причинности. Связь с уравнением Гамильтона-Якоби.



14	Уравнение Шредингера как уравнение неразрывности.
15	Стационарные состояния и их свойства. Стационарное уравнение Шредингера. Задача Штурма-Лиувилля.
16	Изменение средних значений физических величин с течением времени.
17	Предельный переход от квантовой механики к классической. Условия применимости предельного перехода от квантово-механического описания к квазиклассическому.
18	Метод ВКБ. Точки поворота.
19	Правило квантования Бора-Зоммерфельда.
20	Гармонический осциллятор. Метод вторичного квантования. Операторы рождения и уничтожения.
21	Приближение независимых электронов.
22	Метод самосогласованного поля.
23	Общие особенности движения частицы в поле сферической симметрии.
24	Свободное движение с определенным значением орбитального момента.
25	Движение в сферически симметричной прямоугольной потенциальной яме.
26	Движение в кулоновском поле.
27	Атомные орбитали водородоподобного атома.
28	Теория возмущений в стационарных состояниях с дискретным спектром.
29	Теория возмущений при наличии двух близких уровней.
30	Теория возмущений при наличии вырождения.
31	Уравнение Шредингера для системы, состоящей из одинаковых частиц.
32	Симметричные и антисимметричные волновые функции.
33	Возбужденные состояния атома гелия. Орто- и парагелий.
34	Метод Хартри-Фока.
35	Статистический метод Томаса-Ферми.
36	Квантовые числа многоэлектронного атома.
37	Термы многоэлектронных атомов.

### 5.2.2 Типовые тестовые задания

не предусмотрены

### 5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

Рассчитайте энергии молекулярных орбиталей циклобутана аналитическим и графическим способами. Объясните, почему молекула является нестабильной.

Используя энергетическую диаграмму молекулярных орбиталей циклобутана, объясните устойчивость комплекса циклобутандиенжелезотрикарбонила.

Рассчитайте энергии молекулярных орбиталей циклопентадиена в методе МОХ. Составьте энергетическую диаграмму молекулярных орбиталей.

Рассчитайте энергии молекулярных орбиталей циклопентадиена аналитическим и графическим способом. Составьте энергетическую диаграмму. Предскажите устойчивость этой системы.

Рассчитайте энергии молекулярных орбиталей циклооктатетраена аналитическим и графическим способом. Составьте энергетическую диаграмму. Предскажите устойчивость этой системы.

Объясните, почему циклобутандиен  $C_4H_4$  и циклооктатетраен  $C_8H_8$  не могут быть ароматическими системами. Ответ поясните соответствующими энергетическими диаграммами.

Рассчитайте коэффициенты при атомных орбиталях в молекулярных орбиталях этилена. Запишите вид молекулярных орбиталей. Каковы энергии молекулярных орбиталей?

Рассчитайте коэффициенты при атомных орбиталях в молекулярных орбиталях 1,3-бутадиена. Запишите вид молекулярных орбиталей. Каковы энергии молекулярных орбиталей?

Рассчитайте коэффициенты при атомных орбиталях в молекулярных орбиталях 1,3,5-гексатриена. Запишите вид молекулярных орбиталей. Каковы энергии молекулярных орбиталей?

Рассчитайте коэффициенты при атомных орбиталях в молекулярных орбиталях метоксиэтилена. Запишите вид молекулярных орбиталей. Каковы энергии молекулярных орбиталей? Вычислите электронные плотности, заряды на атомах и порядки связей в молекуле метоксиэтилена. Составьте молекулярную диаграмму.

## 5.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

### 5.3.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

### 5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная

 + 

Письменная

Компьютерное тестирование

Иная

### 5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Возможность пользоваться справочными таблицами и калькулятором.  
Время подготовки ответов на задания экзаменационного билета - 45 минут.

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
<b>6.1.1 Основная учебная литература</b>				
Бурмистрова, Н. А., Пожаров, М. В., Смотров, М. П.	Квантовая механика и квантовая химия	Саратов: Издательство Саратовского университета	2020	<a href="https://www.iprbooks.hop.ru/106265.html">https://www.iprbooks hop.ru/106265.html</a>
Ширяев, А. К.	Квантовая механика и квантовая химия	Самара: Самарский государственный технический университет, ЭБС АСВ	2017	<a href="https://www.iprbooks.hop.ru/90518.html">https://www.iprbooks hop.ru/90518.html</a>
<b>6.1.2 Дополнительная учебная литература</b>				
Овсюк, Е. М., Веко, О. В., Войнова, Я. А., Кисель, В. В., Редьков, В. М.	Квантовая механика частиц со спином в магнитном поле	Минск: Белорусская наука	2017	<a href="https://www.iprbooks.hop.ru/74074.html">https://www.iprbooks hop.ru/74074.html</a>
Краснопевцев, Е. А.	Квантовая механика в приложениях к физике твёрдого тела	Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет	2017	<a href="https://www.iprbooks.hop.ru/91725.html">https://www.iprbooks hop.ru/91725.html</a>

### 6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

1. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» [Электронный ресурс]. URL:<http://window.edu.ru/>.
2. Электронно-библиотечная система IPRbooks: <http://www.iprbookshop.ru>
3. Электронная библиотека учебных изданий СПбГУПТД: <http://publish.sutd.ru>
4. Единый портал интернет тестирования в сфере образования [Электронный ресурс]. URL:<http://www.i-exam.ru/>.
5. Материалы Информационно-образовательной среды заочной формы обучения СПбГУПТД [Электронный ресурс]. URL:[http://sutd.ru/studentam/extramural\\_student/](http://sutd.ru/studentam/extramural_student/).

### 6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftOfficeProfessional  
Microsoft Windows

### 6.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Аудитория	Оснащение
Компьютерный класс	Мультимедийное оборудование, компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска
Учебная аудитория	Специализированная мебель, доска