



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФГБОУ ВО «ИГУ»
Кафедра физической и коллоидной химии



УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета, доц.
А.И. Вильмс
«17» мая 2021г.

Рабочая программа дисциплины Б1.О.30

Наименование дисциплины **КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА**

Направление подготовки **04.03.01 - Химия**

Направленность: **химия.**

Квалификация выпускника – **БАКАЛАВР**

Форма обучения **очная**

Согласовано с УМК_химического
факультета

Протокол № 6 от «17» мая 2021 г.

Председатель 
А.И. Вильмс.

Рекомендовано кафедрой физической и
коллоидной химии:

Протокол № 6 «12» мая 2021 г.

Зав. кафедрой 
Шmidt А.Ф.

Иркутск 2021 г.

1. Цели и задачи дисциплины (модуля)
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП.
3. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля)
4. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы
5. Содержание дисциплины (модуля)
 - 5.1 Содержание разделов и тем дисциплины (модуля)
 - 5.2 Разделы дисциплины (модуля) и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами (модулями)
 - 5.3 Разделы и темы дисциплин (модулей) и виды занятий
6. Перечень семинарских, практических занятий, лабораторных работ, план самостоятельной работы студентов, методические указания по организации самостоятельной работы студентов
 - 6.1. План самостоятельной работы студентов
 - 6.2. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов
7. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)
8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):
 - а) основная литература;
 - б) дополнительная литература;
 - в) программное обеспечение;
 - г) базы данных, поисково-справочные и информационные системы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)
10. Образовательные технологии
11. Оценочные средства (ОС)

I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ:

Цели:

формирование базовых представлений об основных законах микромира, изучение понятийного и математического аппарата квантовой механики и их приложение к описанию строения атомов и молекул и объяснению феномена химической связи.

Задачи:

- ознакомить студентов с основными положениями и базовым математическим аппаратом квантовой механики;
- разъяснить сущность методов приближенного решения уравнения Шредингера;
- раскрыть суть фундаментальных понятий и представлений современной теории химического строения молекул;
- расширить знания о строении атомов и молекул, природе химических связей, а также движущих силах химической реакции;
- продемонстрировать возможности квантовой теории для прогнозирования электронного строения, свойств и реакционной способности молекул на молекулярном и субмолекулярном уровнях.

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

2.1. Учебная дисциплина Б1.О.30 – «Квантовая механика» относится к обязательной части программы естественнонаучного цикла.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами:

- Б1.О.10 – «Математика»,
- Б1.О.12 – «Дополнительные главы математики»,
- Б1.О.13 – «Механика и молекулярная физика»,
- Б1.О.14 – «Электричество и магнетизм»,
- Б1.О.15 – «Оптика и строение атома»;
- Б1.О.23 – «Информатика и вычислительная техника».

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- Б1.О.29 – «Строение вещества»,
- Б1.В.04 – «Физические методы исследования»,
- Б1.О.20 – «Органическая химия»,
- Б1.О.21 – «Органическая химия производных углеводов»,
- ФТД.03 – «Компьютерное моделирование молекулярных систем: от схемы до механизма реакции»,
- ФТД.04 – «Основы химических реакций».

Содержание курса способствует формированию современных представлений о природе химической связи и входит в необходимый минимум профессиональных знаний выпускников химического факультета. Фундаментальные понятия и представления, рассмотренные в курсе «Квантовая механика», будут использоваться в курсах «Физическая химия», «Органическая химия», а также во всех спецкурсах, в которых необходимо учитывать сведения об электронном и пространственном строении химических соединений. В сочетании с другими дисциплинами общего естественнонаучного цикла курс «Квантовая механика» призван формировать у студентов целостную систему знаний о природе окружающего мира.

III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций (элементов следующих компетенций) в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по данному направлению подготовки 04.03.01 «Химия», профиль: теоретическая и прикладная химия:

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1 Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	Знать: основные этапы и закономерности развития квантовой механики, ее основные положения и методы;
	ОПК-1.2 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	Знать: качественные особенности аналитических решений уравнения Шредингера для простейших систем; Уметь: использовать понятийный и математический аппарат квантовой механики для интерпретаций данных о строении атомов и молекул, Владеть: навыками критического анализа химической литературы.
ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знать: возможности и границы применимости химических теорий; основные приближения, используемые для описания многоэлектронных систем. Уметь: определять строение сопряженных соединений в рамках простейшего варианта метода МО ЛКАО.
ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	ОПК-4.3 Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	Уметь: пользоваться понятийным и математическим аппаратом квантовой механики для исследования простейших квантовых систем; Владеть: фундаментальными представлениями о строении атомных и молекулярных систем и природе химической связи

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 часов,
в том числе 0,75 зачетных единиц, 27 часов на экзамен.

Из них реализуется с использованием дистанционных образовательных технологий 180 часов

Форма промежуточной аттестации: экзамен (дистанционно)

4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися					
			Лекции	Семинарские (практические занятия)	Из них практическая подготовка	Консультации +КСР+КО		
1.	Основные этапы становления квантовой теории	4	2	–	–	1	2	собеседование
2.	Математический аппарат квантовой механики	4	4	2	2	2	8	Проверка ПР-1, собеседование
3.	Постулаты и основные соотношения квантовой механики		4	2	2	2	8	Проверка ПР-2, собеседование
4.	Задача о частице в потенциальном ящике		2	2	2	1	6	Проверка ПР-3, собеседование
5.	Задача о водородоподобном атоме		2	2	2	1	6	Проверка ПР-4, собеседование
6.	Приближенные методы решения уравнения Шредингера		6	2	2	2	16	Проверка ПР-5, собеседование

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися					
			Лекции	Семинарские (практические занятия)	Из них практическая подготовка	Консультации +КСР+КО		
7.	Системы многих частиц. Тождественность частиц. Симметрия волновой функции.		4	2	2	2	8	Проверка ПР-6, собеседование
8.	Рассмотрение молекулы H ₂ по методу Гейтлера-Лондона. Теория направленной валентной связи		4	2	2	2	12	Проверка ПР-7, собеседование
9.	Метод МО для двухатомных молекул		4	2	2	2	4	Проверка ПР-8, собеседование
10.	Метод МО для многоатомных молекул		4	2	2	2	12	Коллоквиум
Итого часов			36	18		17	82	Экзамен

4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
	Основные этапы становления квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики	Подготовка к собеседованию № 1		10	ПР-1, собеседование	см. список рекомендуемой литературы (1,4, 6,7,8, 13, 14)
	Постулаты и основные соотношения квантовой механики	Подготовка к собеседованию № 2		8	ПР-2, собеседование	см. список рекомендуемой литературы (1,4, 6,7,8, 13, 14)

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
	Задача о частице в потенциальном ящике	Подготовка к собеседованию № 3		6	ПР-3, собеседование	см. список рекомендуемой литературы (1, 2, 6,7,8, 13, 14)
	Задача о водородоподобном атоме	Подготовка к собеседованию № 4		6	ПР-4, собеседование	см. список рекомендуемой литературы (1,4, 6,7,8, 13, 14)
	Приближенные методы решения уравнения Шредингера	Подготовка к собеседованию № 5		16	ПР-5, ПР-6, собеседование	см. список рекомендуемой литературы (1,6,7,8, 13, 14)
	Системы многих частиц. Тождественность частиц. Симметрия волновой функции.	Подготовка к собеседованию № 6		8	ПР-7, собеседование	см. список рекомендуемой литературы (1,6,7,8, 13, 14)
	Рассмотрение молекулы H_2 по методу Гейтлера-Лондона. Теория направленной валентной связи	Подготовка к собеседованию № 6		12	ПР-8, собеседование	см. список рекомендуемой литературы (1,6,7,8, 13, 14)
	Метод МО для двухатомных молекул	Подготовка к собеседованию № 7		4	ПР-9, собеседование	см. список рекомендуемой литературы (1,6,7,8)
	Метод МО для многоатомных молекул	Подготовка к собеседованию № 8		12	Коллоквиум	см. список рекомендуемой литературы (1,6,7,8)
Общая трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине (час)				82		
Бюджет времени самостоятельной работы, предусмотренный учебным планом для данной дисциплины (час)				82		

4.3 Содержание учебного материала

Содержание разделов и тем дисциплины

1. Основные этапы становления квантовой теории.

Дискретность излучения и поглощения света. Излучение абсолютно черного тела; гипотеза Планка. Законы фотоэффекта Эйнштейна. Эффект Комптона. Соотношение де Бройля. Дифракция электронов.

Дискретность свойств атомно-молекулярных систем. Опыты Франка–Герца, Штерна–Герлаха. Спектральные серии водородоподобных атомов. Планетарная модель атома. Уравнение Шредингера.

2. Математический аппарат квантовой механики.

Регулярные функции. Комплексно сопряженные функции. Нормированные функции. Ортогональные функции. Операторы. Сумма и произведение операторов. Обратный оператор. Коммутатор.

Линейные операторы. Собственные функции и собственные значения линейного оператора. Вырожденные собственные функции.

Самосопряженные операторы. Свойства собственных значений и собственных функций самосопряженного оператора. Теоремы, связывающие системы собственных функций двух операторов с коммутационными отношениями между ними.

Разложение функций в ряд. Представление, базис, представители. Ортогональные и нормированные базисные наборы. Условие нормировки волновой функции, разложенной в ряд. Представление операторов в матричной форме.

3. Постулаты и основные соотношения квантовой механики.

Постулаты квантовой механики. Вероятностное толкование волновой функции. Способ описания наблюдаемых в квантовой механике величин. Операторы координаты, импульса, потенциальной энергии. Стационарное уравнение Шредингера. Возможные значения, получаемые при измерении физической величины. Точное и среднее значение. Соотношение неопределенностей как следствие постулатов. Соотношение неопределенностей Гейзенберга.

4. Задача о частице в потенциальном ящике.

Частица в потенциальном ящике. Постановка задачи для трехмерного случая. Разделение переменных. Одномерная потенциальная яма. Граничные условия. Квантование энергии. Зависимость расстояния между уровнями от размеров ямы и массы частицы. Трехмерный случай: вырождение уровней, кратность вырождения.

Качественные оценки: потенциальная яма конечной глубины и устойчивость атома; двухъямный потенциал, туннельный эффект; потенциальная яма с параболическими и гиперболическими стенками.

5. Задача о водородоподобном атоме.

Водородоподобный атом. Постановка задачи. Отделение переменных, связанных с движением ядер. Разделение пространственных переменных.

Энергетический спектр водородоподобных атомов. Классификация атомных орбиталей. Квантовые числа Вид волновых функций водородоподобных атомов. Различные способы представления радиальной зависимости. Сферические гармоники.

6. Приближенные методы решения уравнения Шредингера.

Основная теорема вариационного метода. Условие минимума энергии. Общая идея вариационного метода. Вариационный метод Ритца (линейный вариационный метод). Вековое уравнение.

Основная идея теории возмущений. Невозмущенная система, возмущение, поправки. Вывод уравнений для нахождения поправок первого и второго порядков. Определение поправок первого порядка к энергии и волновой функции в отсутствие вырождения. Определение поправок первого порядка к энергии при наличии вырождения. Снятие вырождения.

7. Системы многих частиц.

Многоэлектронные системы. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри. Метод самосогласованного поля.

Тождественность частиц. Симметрия волновой функции. Принцип Паули. Антисимметризованное произведение, определитель Слейтера. Метод Хартри–Фока. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении. Средняя энергия в одноэлектронном приближении. Одноэлектронные энергии, теорема Купменса.

Молекулярные системы. Разделение движения электронов и ядер. Приближение Борна–Оппенгеймера.

8. Теория направленной валентной связи.

Рассмотрение молекулы водорода по Гайтлеру–Лондону. Постановка задачи. Невозмущенная система, оператор возмущения. Вид волновой функции с учетом принципа тождественности частиц. Вековое уравнение, физический смысл входящих в него интегралов. Симметричная и антисимметричная пространственные волновые функции, зависимость энергии соответствующих состояний от расстояния между ядрами. Учет спиновой составляющей волновой функции. Синглетное и триплетное состояния молекулы водорода.

Обобщение теории Гайтлера–Лондона. Метод локализованных электронных пар. Определение направленных валентностей по критерию максимума перекрытия. Концепция гибридизации. Канонические структуры и концепция резонанса.

9. Метод молекулярных орбиталей для двухатомных молекул.

Приближения метода МО ЛКАО. Рассмотрение молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Понятие орбитали. Энергия и вид связывающих и разрыхляющих МО. Сравнение результатов методов МО и ВС. Ионные состояния.

Электронные конфигурации и корреляционные диаграммы двухатомных молекул. Квантовые числа и молекулярные орбитали. Симметрия молекулярных термов. Связывающие и разрыхляющие МО. Электронные конфигурации гомоядерных двухатомных молекул и их ионов. Порядок связи и прочность связи.

Гетероядерные двухатомные молекулы в методе МО. Зависимость энергии взаимодействия от энергий взаимодействующих АО и полярность образующейся связи.

10. Метод молекулярных орбиталей для многоатомных молекул.

Метод МО Хюккеля для непредельных углеводородных систем. σ - π -приближение.

Электронное распределение в молекулах этилена и бутадиена. Энергия делокализации. Заряды на атомах и порядки связей. Общее решение для линейных полиенов. Диаграммы Фроста.

Анализ результатов расчета молекул циклобутадиена и бензола. Ароматичность и антиароматичность. Общее решение и диаграммы Фроста для циклических полиенов. Правило Хюккеля.

Введение гетероатомов в теорию Хюккеля. Молекула формальдегида.

Связь электронного строения с реакционной способностью. Теория граничных орбиталей. Концепция жестких и мягких кислот и оснований. Путь реакции и координата реакции на поверхности потенциальной энергии. Переходное состояние. Симметрия реагентов, переходного состояния и продуктов реакции. Принцип сохранения орбитальной симметрии Вудворда – Хоффмана.

4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

п/п	№ раздела и темы дисциплины	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудо-емкость (час.)	Из них практическая подготовка	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	3	4	5	6	7
1.	2	Математический аппарат квантовой механики.	2	2	ПР-1, собеседов	ОПК-1.1
2.	3	Постулаты и основные соотношения квантовой механики.	2	2	ПР-2, собеседов	ОПК-4.3
3.	4	Энергетический спектр частицы в потенциальном ящике.	2	2	ПР-3, собеседов	ОПК-1.2
4.	5	Задача о водородоподобном атоме.	2	2	ПР-4, собеседов	ОПК-1.2
5.	6	Метод теории возмущений.	2	2	ПР-5, собеседов	ОПК-3.1
6.	6	Вариационный метод.	2	2	ПР-6, собеседов	ОПК-3.1
7.	7,8	Образование химической связи в молекуле водорода.	2	2	ПР-8, собеседов	ОПК-4.3
8.	7,9	Корреляционные диаграммы двухатомных молекул.	2	2	ПР-9, собеседов	ОПК-4.3
9.	10	Электронное строение линейных и циклических полиенов	2	2	Коллоквиум	ОПК-4.3

4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов

№ пп/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	1, 2	Проработка контрольных вопросов собеседования № 1 (см. вопросы текущего контроля).	ОПК-1 ОПК-4	ОПК-1.1 ОПК-4.3
2	3	Проработка контрольных вопросов собеседования № 2	ОПК-1 ОПК-4	ОПК-1.1 ОПК-4.3
3	4	Проработка контрольных вопросов собеседования № 3	ОПК-1 ОПК-4	ОПК-1.2 ОПК-4.3
4	5	Проработка контрольных вопросов собеседования № 4	ОПК-1 ОПК-4	ОПК-1.2 ОПК-4.3
5	6	Проработка контрольных вопросов собеседования № 5	ОПК-3 ОПК-4	ОПК-3.1 ОПК-4.3
6	6	Проработка контрольных вопросов собеседования № 6	ОПК-3 ОПК-4	ОПК-3.1 ОПК-4.3
7	7,8	Проработка контрольных вопросов собеседования № 7	ОПК-4	ОПК-4.3
8	7,9	Проработка контрольных вопросов собеседования № 8	ОПК-4	ОПК-4.3
9	7-9	Проработка контрольных вопросов собеседования № 8	ОПК-4	ОПК-4.3
10	10	Подготовка к коллоквиуму	ОПК-4	ОПК-4.3

4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с закреплением теоретического материала в виде подготовки к собеседованиям коллоквиумам, проводится во внеаудиторное время.

В ходе подготовки рекомендуется:

- Повторить лекционный материал по демонстрационным слайдам. Этот демонстрационный материал представлен в ЭИОС ИГУ.
- При необходимости обратиться к рекомендованной учебной литературе.
- Проработать контрольные вопросы по собеседованиям (представлены в ЭИОС ИГУ)
- При необходимости обратиться за консультацией к преподавателю.

4.4. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)

Выполнение курсовых работ не планируется

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература

1. 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.
2. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Учеб. пособие. / В.Г.Цирельсон.–М.:БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012.– 495 с. Режим доступа ЭБС издательства «Лань».
3. Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков / А.М. Мелешина.–М.: Высшая школа, 1980.– 215 с.
4. Майер И. Избранные главы квантовой химии / И. Майер; пер. с англ.– М.: Бинум, Лаборатория знаний, 2014.– 384 с. Режим доступа ЭБС издательства «Лань».

б) дополнительная литература

5. Трофимов А.Б. Введение в квантовую химию: учеб. пособие / А.Б. Трофимов.– Иркутск: Изд-во ИГУ, 2013.– 192 с.
6. Валл А.Н. Квантовая механика в задачах : учеб.-метод. пособие / А.Н. Валл.– Иркутск: изд-во ИГУ, 2010, Режим доступа ЭЧЗ «Библиотех».
7. Грибов Л. А., Муштакова С. П. Квантовая химия.– М.: Гардарика, 1999.– 390 с.



в) периодические издания (при необходимости)

г) список авторских методических разработок: (

8. Кобычев В.Б. Квантовая механика для химиков. Конспекты лекций. Часть I. / В. Б. Кобычев, А. Б. Трофимов, Н. М. Витковская, – Иркутск: Издательство ООО «Издательство «Аспринт», 2015. – 120 с.
9. Кобычев В.Б. Квантовая механика для химиков. Конспекты лекций. Часть II. / В. Б. Кобычев, А. Б. Трофимов, Н. М. Витковская, – Иркутск: Издательство ООО «Издательство «Аспринт», 2018. – 124 с.

д) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

10. <http://www.qchem.ru/lectures/>
Курс лекций по квантовой механике и квантовой химии, подготовленный д.х.н., проф. С.Л. Хурсаном (БашГУ)
11. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/borschevskii/1part.pdf>
А.Я. Борщевский Структура атомных частиц. Водородоподобные атомы.
12. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/borschevskii/2part.pdf>
А.Я. Борщевский Структура атомных частиц. Многоэлектронные атомы.
13. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/kovba-pupyshev/welcome.html>
В.М.Ковба, В.И.Пупышев Двухатомные молекулы: спектры и молекулярные постоянные.

VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Помещения для проведения лекционных и практических занятий, укомплектованные необходимым оборудованием, а именно:

- аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий ауд. 5, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU.
- компьютерный класс химического факультета (ауд. 209) оборудован 12 ПК Intel Pentium IV с установленным пакетом MS Office. Имеется локальная сеть.

6.2. Программное обеспечение:

Лицензируемое ПО:

- MS Excel в составе MS Office - 2016

Свободно распространяемые программы:

- Firefly – программа неэмпирических расчетов [Alex A. Granovsky, Firefly version 8, [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)];
- Molecular Modeling and Simulation Kit (MaSK) для визуализации результатов расчетов Firefly, наглядного представления строения молекул и вида МО.

6.3. Технические и электронные средства:

Все читаемые лекции сопровождаются презентациями, доступными для студентов в системе ЭИОС ИГУ.

При подготовке иллюстративного материала использованы перечисленные выше программные средства – MS Office, Firefly, MASK.

VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе изучения дисциплины используются как традиционные, так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения. При прохождении дисциплины «Квантовая механика» предусмотрены:

1) лекции с применением

а) технологий объяснительно-иллюстративных объяснений.

б) объяснительно-иллюстративного метода с элементами проблемного изложения;

в) разбора конкретных ситуаций.

2) практические занятия, во время которых студентами закрепляются навыки решения элементарных задач квантовой механики, имеющих химическое приложения, обсуждаются особенности их решений, качественное поведение микросистем при изменении их параметров. Во время сдачи коллоквиумов обсуждаются вопросы лекций, проводится решение типовых и ситуационных задач;

3) самостоятельная работа студентов, включающая подготовку к практическим занятиям в форме изучения теоретического материала лекций и анализа типовых решений с использованием средств табличного процессора EXCEL, подготовку к текущему контролю успеваемости;

4) консультирование студентов по изучаемым теоретическим и практическим вопросам.

К активным формам обучения относятся:

- Контрольные вопросы и мини-дискуссии в ходе изложения лекционного материала. Такие «спонтанные» обсуждения (на самом деле, конечно же, планируемые) способствуют построению связей между различными частями читаемого курса и формированию целостной картины курса в целом.
- Групповое обсуждение сложных вопросов курса и типичных ошибок при выполнении проверочных работ.

Наименование тем занятий с использованием активных форм обучения:

	Тема занятия	Вид занятия	Форма / Методы интерактивного обучения	Кол-во часов
1	Математический аппарат квантовой механики.	практич.	собеседование / групповая дискуссия	1
2	Постулаты и основные соотношения квантовой механики.	практич	собеседование / групповая дискуссия	1
3	Энергетический спектр	практич	собеседование /	1

	частицы в потенциальном ящике.		групповая дискуссия	
	Задача о водородоподобном атоме.	практич	собеседование / групповая дискуссия	1
	Метод теории возмущений.	практич	собеседование / групповая дискуссия	1
	Вариационный метод.	практич	собеседование / групповая дискуссия	1
	Образование химической связи в молекуле водорода.	практич	собеседование / групповая дискуссия	1
	Корреляционные диаграммы двухатомных молекул.	практич	собеседование / групповая дискуссия	1
	Электронное строение линейных и циклических полиенов	практич	коллоквиум	2
Итого часов				10

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:

№ п/п	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
	Выполнение письменной проверочной работы (ПР), собеседование	Математический аппарат квантовой механики.	ОПК-1, ОПК-3, ОПК-4
	Выполнение ПР, собеседование	Постулаты и основные соотношения квантовой механики.	ОПК-1, ОПК-3, ОПК-4
	Выполнение ПР, собеседование	Энергетический спектр частицы в потенциальном ящике.	ОПК-1, ОПК-3, ОПК-4
	Выполнение ПР, собеседование	Задача о водородоподобном атоме.	ОПК-1, ОПК-3, ОПК-4
	Выполнение ПР, собеседование	Метод теории возмущений.	ОПК-1, ОПК-3, ОПК-4
	Выполнение ПР, собеседование	Вариационный метод.	ОПК-1, ОПК-3, ОПК-4
	Выполнение ПР, собеседование	Образование химической связи в молекуле водорода.	ОПК-1, ОПК-3, ОПК-4
	Выполнение ПР, собеседование	Корреляционные диаграммы двухатомных молекул.	ОПК-1, ОПК-3,

			ОПК-4
	Коллоквиум	Электронное строение линейных и циклических полиенов	ОПК-1, ОПК-3, ОПК-4
	Экзамен		ОПК-1, ОПК-3, ОПК-4

Демонстрационный вариант ПР №9

1. Как в классической механике определяется момент импульса? Запишите соответствующие операторы для l_x , l_y , l_z и l^2 .
2. Почему при ненулевой величине углового момента его вектор не может быть направлен вдоль выделенной оси z ?
3. Используя матрицы Паули,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

покажите, что $S^2 \alpha = \frac{3}{4} \hbar^2 \alpha$.

4. Какие ограничения налагает на волновую функцию принцип Паули?
5. Используя определитель Слейтера, запишите волновую функцию для атома лития в состоянии $1s^2 2s^1$. Учтите, что $2s$ -электрон может с равной вероятностью иметь как α , так и β спин.
6. Покажите, что два $1s$ -электрона атома лития не могут иметь одинаковых спинов.
7. Запишите волновую функцию метода ВС молекулы H_2 в виде двух определителей.
8. Волновая функция вида $\Phi_0 = c_0 \left\{ \left| 1s_A \overline{1s_B} \right| - \left| \overline{1s_A} 1s_B \right| \right\}$ недооценивает вклад ионных структур. Как записать волновую функцию, учитывающую ионные вклады? Как определить вклад каждой структуры в волновую функцию молекулы H_2 ?
9. Сколько детерминантов потребуется для описания молекулы $:C=O$? молекулы HCN ?

Вопросы для собеседования № 1

Тема 2. Математический аппарат квантовой механики

1. Каков результат действия оператора $\frac{d^2}{dx^2}$ на функцию $\sin(ax)$? на функцию $\cos(ax)$?
2. Будет ли функция $c_1 \sin ax + c_2 \cos ax$ собственной функцией оператора $\frac{d^2}{dx^2}$? Можно ли ответить на этот вопрос на основании решения предыдущей задачи?
3. Линеен ли оператор $\mathcal{A}f(x) = f^2(x)$?
4. Вычислите $\left[\frac{\partial}{\partial x}, y \right]$.
5. Вычислите $\sum_{n=1}^5 a_n \delta_{3n}$. Запишите общее решение для $\sum_k a_k \delta_{mk} =$
6. Покажите, что оператор импульса является самосопряженным.
7. Покажите, что если оператор \mathcal{A} эрмитов, то собственные значения оператора \mathcal{A}^2 неотрицательны.
8. Операторы \mathcal{A} и \mathcal{B} коммутируют. Как будет выглядеть оператор \mathcal{B} в \mathcal{A}^2 представлении?

Вопросы для собеседования № 2

Тема 3. Постулаты и основные соотношения квантовой механики.

1. Постулат 1 вводит способ описания квантовой системы.
 - Дайте формулировку первого постулата.
 - Что описывает волновая функция $\psi(x,y,z,t)$ для одной частицы?
 - Почему необходимо, чтобы $\int \psi^* \psi d\tau = 1$?
 - Какими свойствами должна обладать $\psi(x,y,z,t)$?
 - Пусть r – расстояние до некоторой фиксированной точки ($0 \leq r \leq \infty$). Может ли функция $A \exp(ar)$ быть волновой функцией при $a > 0$? при $a < 0$? при $a = 0$?
2. Постулат 2 связан с изменением волновой функции от времени. Сформулируйте его.
3. Постулат 3 определяет способ описания наблюдаемых в квантовой механике величин.
 - Дайте формулировку третьего постулата.
 - Как определяется оператор координаты?
 - Как определяется оператор x -составляющей импульса?
 - Почему эти операторы должны быть самосопряженными?
4. Постулат 4 определяет возможные значения, получаемые при измерении физической величины F . Сформулируйте его.
5. Постулат 5 определяет среднее значение величины F для системы, находящейся в состоянии ψ .
 - Чему равно это среднее значение для произвольной функции ψ ?
 - Чему равно это среднее значение для функции ψ , являющейся собственной функцией оператора физической величины F ?
 - Частица находится в состоянии ψ , не являющемся решением уравнения $\mathcal{E}\phi_i = \lambda_i \phi_i$. Возможно ли, что при измерении величины L будет получено значение λ_2 ?
 - Частица из предыдущей задачи находится в состоянии $\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + c_3\phi_3 + c_4\phi_4 + c_5\phi_5$. Какова вероятность того, что при измерении L будет получено значение λ_2 ?
 - Сформулируйте теоремы, связывающую коммутацию операторов физических величин A и B и наборы соответствующих этим операторам собственных функций.
 - Как связан пятый постулат с соотношением неопределенностей Гейзенберга?

Вопросы для собеседования № 3

Тема 4. Энергетический спектр частицы в потенциальном ящике

1. Запишите уравнение Шредингера для трехмерного потенциального ящика. Разделите переменные. Запишите три независимых уравнения. Почему $E = E_x + E_y + E_z$?
2. Перепишите уравнение для $X(x)$ в виде уравнения на собственные значения. Покажите, что функция $X(x) = c_1 \sin bx + c_2 \cos bx$ является собственной функцией этого уравнения. Что будет собственным значением этого уравнения? Какие значения могут принимать c_1 , c_2 и b ? Какие значения может принимать энергия E_x ? Может ли быть $E_x = 0$?
3. Какое значение принимает $X(x)$ вне потенциальной ямы? на стенках потенциальной ямы? Почему?
4. Какие значения могут принимать при этих ограничениях c_1 , c_2 и b ? Какие значения может принимать энергия E_x ? Может ли частица в потенциальной яме находиться в покое?
5. С использованием EXCEL

- Найдите разность энергий второго и третьего энергетических уровней потенциальной ямы ширины A .
 - Проанализируйте, как меняется расстояние между уровнями по мере роста n . Как меняется расстояние между уровнями с увеличением ширины ямы? Что будет при увеличении ширины ямы до макроскопических размеров?
 - Как меняется энергия основного состояния при уменьшении ширины ямы? Как это связано с соотношением неопределенностей Гейзенберга?
 - Постройте графики $X(x)$ и $X^2(x)$ для $n = 1, 2, 3$.
 - Для квадратного ($a = b$) двумерного потенциального ящика постройте вырожденные волновые функции для $n_x = 1, n_y = 2$ и $n_x = 2, n_y = 1$.
6. Для потенциального ящика, имеющего форму куба, найдите кратность вырождения при совпадении двух квантовых чисел. Какова максимальная кратность вырождения?

Вопросы для собеседования №1 4

Тема 5. Волновые функции водородоподобного атома

1. Что такое водородоподобный атом?
2. Запишите для водородоподобного атома уравнение Шредингера, включающее движение электронов и ядер. Почему необходимо исключить движение ядра? Как это можно сделать?
3. Запишите электронное уравнение Шредингера в декартовых координатах. Какие трудности возникают при его решении?
4. Что такое сферические координаты? Каковы пределы их изменения?
5. Запишите уравнение Шредингера в сферических координатах и разделите переменные.
6. Решите уравнение для $\Phi(\varphi)$. Покажите, что это уравнение имеет дискретный спектр. Какие значения может принимать m_l ?
7. Какие значения может принимать квантовое число l ? Какие значения при заданном l может принимать m_l ? Как обозначаются атомные функции с $l = 2$?
8. Постройте сечение гармоники $Y_{1,0}$ для $\varphi = 0$. Как выглядит в пространстве $Y_{1,0}^2$? Как выглядит $Y_{1,1}^2$? Получите **вещественные** гармоники из $Y_{1,1}$ и $Y_{1,-1}$.
9. С использованием EXCEL
 - Постройте графики R_{10} и R_{10}^2 . Можно ли по этим графикам предсказать размер атома водорода?
 - Как определяется вероятность $Q_{nl}(r)$ обнаружить электрон на поверхности сферы радиуса r ? Постройте вид Q_{10} и Q_{20} .
 - Сколько узлов содержит R_{nl} ? Приведите на одном графике вид R_{30}, R_{31}, R_{32} и R_{33} . Одинаково ли положение главных максимумов функций Q_{30}, Q_{31}, Q_{32} и Q_{33} ?
10. Дайте интерпретацию формуле Бальмера для спектра водорода: $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$.
 R – постоянная Ридберга, λ – длина волны, а что такое 2^2 ? Какие значения может принимать n ?
11. Энергия основного состояния атома водорода равна 13,6 эВ. Рассчитайте энергию основного состояния катиона He^+ .

Вопросы для собеседования № 5

Тема 6. Приближенные методы решения уравнения Шредингера.

1. Метод теории возмущений. Основная идея теории возмущений.
 - Что такое невозмущенная система? Запишите уравнение Шредингера для невозмущенной системы.
 - В каком виде записывается оператор Гамильтона возмущенной системы? Каково условие применимости теории возмущений?

- В каком виде записываются волновые функции возмущенной системы?
 - В каком виде записываются значения энергий возмущенной системы?
2. Получите уравнения для нахождения поправок первого и второго порядков.
 3. Предполагая, что все энергетические уровни невозмущенной системы невырождены,
 - Выведите выражение для поправки первого порядка к энергии.
 - Нужно ли знать поправки к волновой функции для определения поправки первого порядка к энергии?
 - Определите поправку первого порядка к волновой функции. Почему эти выражения неприменимы в случае вырожденной невозмущенной системы?
 4. Пусть теперь k -й уровень невозмущенной системы n -кратно вырожден.
 - Выведите уравнения для нахождения поправки первого порядка к энергии.
 - Сколько всего будет таких уравнений?
 - Запишите вековой определитель для трехкратно вырожденной системы.
 - Что означает утверждение: «под действием возмущения вырождение снимается»?
 5. Вариационный метод. Что такое функция, оператор, и функционал?
 6. Сформулируйте (с использованием понятия функционала и без него) основную теорему вариационного метода.
 7. Докажите эту теорему.
 8. В каком случае может оказаться, что величина $E = \int \psi \hat{H} \psi d\tau = E_0$?
 9. Изложите основную идею вариационного метода, не прибегая (пока) к явному заданию вида пробной функции. Рассмотрите два варианта:
 - Мы имеем на выбор несколько пробных функций. Как выбрать среди них наилучшую? Что будет, если среди этих функций окажется и точная собственная функция?
 - Мы предполагаем, что наша функция имеет первоначально заданный вид $\psi = c_1 e^{\alpha_1 r} + c_2 e^{\alpha_2 r}$. Как убедиться, что параметры c_1, c_2, α_1 и α_2 выбраны наилучшим образом?
 10. Как строится пробная функция в вариационном методе Ритца? Что при этом полагается известным? Что нужно найти? На основании чего отыскиваются коэффициенты разложения? Получите соответствующие уравнения для общего случая бесконечного набора.
 11. Запишите все уравнения для разложения $\psi = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2 + c_3 \varphi_3 + c_4 \varphi_4$.
 12. Что называется тривиальным решением полученной системы уравнений? Что такое вековой определитель?
 13. Проиллюстрируйте решение задачи для случая $\psi = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2$, полагая функции φ_1 и φ_2 ортонормированными, а интегралы $H_{11} = H_{22}$. Найдите выражения для энергии (сколько значений энергии будет найдено?) и соответствующих волновых функций.

Вопросы для собеседования № 6

Тема 7. Метод ВС

1. Запишите полное уравнение Шредингера для молекулы водорода.
2. С какой целью вводится приближение Борна-Оппенгеймера? В чем оно состоит? Запишите оператор Гамильтона для молекулы водорода с учетом этого приближения.
3. Рассмотрите молекулу H_2 по теории возмущений:
 - Что рассматривается в качестве невозмущенной системы?
 - Чему равна энергия невозмущенной системы?
 - Как выглядит гамильтониан невозмущенной системы?
 - Что будет рассматриваться в качестве оператора возмущения? Что описывает каждый член оператора возмущения?

- Что такое «принцип тождественности частиц»? Является ли этот принцип свойством только квантовых объектов?
 - Как записать волновую функцию невозмущенной системы с учетом тождественности электронов?
 - Почему следует использовать теорию возмущений с учетом наличия вырождения?
4. Запишите вековое уравнение.
 5. Запишите выражения для интегралов S_{ij} .
 6. Запишите кулоновский и обменный интегралы, объясните их физический смысл.
 7. Запишите вековой определитель для системы H_2 . Получите выражения для E_S и E_A .
 8. Получите выражения для волновых функций ψ_S и ψ_A . Что означают индексы S и A ?
 9. Постройте зависимость E_S и E_A от расстояния между ядрами. Как выглядит зависимость энергии от расстояния при учете только кулоновских взаимодействий?
 10. Какие ограничения налагает на волновую функцию принцип Паули?
 11. Почему связанное состояние молекулы может быть образовано только парой электронов с противоположными спинами?

Вопросы для собеседования № 7

Тема 7. Метод ВС

1. Как в классической механике определяется момент импульса? Запишите соответствующие операторы для l_x , l_y , l_z и l^2 .
2. Запишите коммутационные соотношения:

$$[l_x, l_y] = ? \quad [l_y, l_x] = ? \quad [l_x, l^2] = ?$$

3. Почему при ненулевой величине углового момента его вектор не может быть направлен вдоль выделенной оси z ?
4. Чему равно собственное значение квадрата углового момента l^2 ? Какие значения может принимать квантовое число l ?
5. Чему равно собственное значение квадрата углового момента s^2 ? Какие значения может принимать квантовое число s ?
6. Используя матрицы Паули,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

покажите, что $s^2 \alpha = \frac{3}{4} h^2 \alpha$.

7. Какие ограничения налагает на волновую функцию принцип Паули?
8. Используя определитель Слейтера, запишите волновую функцию для атома лития в состоянии $1s^2 2s^1$. Учтите, что $2s$ -электрон может с равной вероятностью иметь как α , так и β спин.
9. Покажите, что два $1s$ -электрона атома лития не могут иметь одинаковых спинов.
10. Покажите, что $\overline{s^2} = \int \int \beta^*(1) \beta^*(2) s^2 \beta(1) \beta(2) d\tau_1 d\tau_2 = 2h^2$.
11. Покажите, что $\overline{s^2} = \int \int \beta^*(1) \alpha^*(2) s^2 \beta(1) \alpha(2) d\tau_1 d\tau_2 = h^2$.
12. Запишите полную волновую функцию основного состояния $^1\Sigma_g^+$ молекулы H_2 , не используя определителей
13. Запишите полную волновую функцию основного состояния $^1\Sigma_g^+$ молекулы H_2 , используя определитель Слейтера для спиновой части.
14. Запишите волновую функцию метода ВС молекулы H_2 в виде двух определителей.

15. Волновая функция вида $\Phi_0 = c_0 \{ |1s_A 1s_B| - |\overline{1s_A} 1s_B| \}$ недооценивает вклад ионных структур. Как записать волновую функцию, учитывающую ионные вклады? Как определить вклад каждой структуры в волновую функцию молекулы H_2 ?
16. Запишите волновую функцию метода ВС для молекулы HF с представлением всех детерминантов в виде $|1s_F \overline{1s_F} K|$. Какова размерность этих детерминантов?
17. Сколько детерминантов потребуется для описания молекулы $:C=O$? молекулы HCN ?

Вопросы для собеседования № 8

Тема 8. Одноэлектронное приближение. Основы метода МО.

1. Запишите электронное уравнение Шредингера для атома гелия. Какие члены этого уравнения зависят от координат обоих электронов?
2. С какой целью вводится одноэлектронное приближение? Запишите набор одноэлектронных уравнений для атома гелия.
3. В каком виде записывается полная волновая функция метода Хартри? Чему равна энергия многоэлектронной системы по Хартри? Как они запишутся для атома гелия?
4. Метод самосогласованного поля: проблема записи уравнений Хартри и способ решения.
5. В каком виде из одноэлектронных орбиталей строится полная волновая функция, соответствующая принципу Паули?
6. Запишите определитель Слейтера для атома лития в состоянии $1s^2 2s^1$.
7. Перечислите приближения метода МО ЛКАО.
8. Рассмотрите молекулу H_2 по методу МО ЛКАО:
 - Как записываются одноэлектронные МО?
 - Запишите полную волновую функцию для основного состояния молекулы водорода.
 - Запишите набор уравнений Рутаана.
 - Найдите энергии и вид σ_g и σ_u^* МО. Что означают символы g и u ?
9. Сравните полную волновую функцию метода МО для основного состояния молекулы водорода с функцией, полученной в методе ВС. В чем различие полученных функций?
10. Постройте схему МО для молекулы He_2 . Почему такая молекула неустойчива? Будет ли устойчив ион He_2^+ ?
11. Постройте схему МО молекулы N_2 . Каков порядок связи в этой молекуле? Как изменится длина связи при переходе от N_2 к N_2^+ ?
12. Постройте схему МО молекулы O_2 . Почему молекула кислорода парамагнитна? Каков порядок связи в этой молекуле? Как изменится длина связи при переходе от O_2 к O_2^+ ?
13. Известно, что энергия связи уменьшается в ряду $N_2 > O_2 > F_2$ (225, 118 и 37 ккал/моль, соответственно). Объясните эту закономерность.
14. Постройте схему МО молекулы LiH ($PI_{Li} = 5,4$ эВ; $PI_H = 13,6$ эВ). Как распределена в этой молекуле электронная плотность?
15. Постройте схему МО молекулы HF ($PI_F = 17,4$ эВ). Как распределена в этой молекуле электронная плотность?
16. Какая из молекул более полярна: LiF или HF ? Почему?

Вопросы для коллоквиума №1

Тема 10. Метод МО ЛКАО Хюккеля

1. Какие приближения использует метод МО ЛКАО Хюккеля?
2. С какой целью вводится π -приближение?
3. Почему такое приближение оправданно? Почему такое приближение допустимо?
4. Как в приближении Хюккеля определяются интегралы перекрывания $S_{\mu\nu}$?

5. Как в приближении Хюккеля определяются интегралы $H_{\mu\nu}$?
6. Как в приближении Хюккеля определяются полная энергия π -системы?
7. Рассчитайте молекулу этилена по методу Хюккеля. Чему равна полная энергия π -системы? Чему равна энергия π -связи? Какова энергия $\pi \rightarrow \pi^*$ перехода?
8. Рассчитайте энергию молекулы бутадиена по методу Хюккеля. Какого значения полной энергия π -системы можно было ожидать для системы из двух изолированных π -связей? Какова энергия π -системы для двух сопряженных π -связей?
9. Как в методе Хюккеля определяется величина заряда на атоме?
10. Как в методе Хюккеля определяется величина порядка связи?
11. Рассмотрите МО молекулы бутадиена. Рассчитайте порядки связей в этой молекуле. Почему порядок связи C2–C3 отличен от нуля? Как согласуется этот результат с экспериментальными данными о длинах связей в молекуле бутадиена?
12. Как в методе Хюккеля определяется индекс свободной валентности? Рассчитайте индексы свободной валентности для углеродных атомов бутадиена. Как полученный результат согласуется с данными о протекании реакции бромирования бутадиена?
13. Рассчитайте по методу Хюккеля энергетические уровни аллильной системы. Чему равна энергия связывания в аллильном радикале? в аллильном катионе? в аллильном анионе? Изобразите несвязывающую МО.
14. В рамках метода Хюккеля рассчитайте распределение зарядов в аллильном катионе и аллильном анионе.
15. Найдите общее решение для энергии линейных полиенов. Как представить полученное решение графически? Рассчитайте энергию делокализации в молекуле октатетраена $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$.
16. Рассчитайте энергетические уровни молекулы бензола. Чему равна энергия делокализации в этой молекуле?
17. Рассчитайте энергетические уровни молекулы циклобутадиена. Чему равна энергия делокализации в этой молекуле?
18. Используя диаграммы Фроста для циклических полиенов объясните правило ароматичности Хюккеля.
19. Проиллюстрируйте правило Хюккеля для систем с $n=1$ (бензол, циклопентадиенил-анион, тропилий-катион, азулен).
20. Применимо ли это правило для молекулы нафталина?
21. Почему неароматичны молекулы циклодекапентаена ($n=2$) и 14-аннулена ($n=3$)?
22. Как рассматриваются гетероатомы в методе Хюккеля? Как видоизменяются диагональные элементы? Как видоизменяются внедиагональные элементы?
23. Рассчитайте энергию молекулы формальдегида по методу Хюккеля. Сравните энергию π -связей в этилене и формальдегиде.
24. Как распределена электронная плотность в молекуле формальдегида? Как изменится электронное распределение при переходе молекулы в возбужденное состояние?
25. Покажите, что матрица собственных векторов молекулы бутадиена приводит хюккелевскую матрицу \mathbf{h} к диагональному виду.

Примерный перечень вопросов и заданий к экзамену

Вопросы:

1. Регулярные функции. Комплексно сопряженные функции. Нормированные функции. Ортогональные функции.
2. Операторы. Сумма операторов. Произведение операторов. Обратный оператор. Коммутатор.

3. Линейные операторы. Собственные функции и собственные значения линейного оператора. Вырожденные собственные функции. Докажите, что произвольная линейная комбинация вырожденных собственных функций линейного оператора также является его собственной функцией с тем же собственным значением.
4. Самосопряженные операторы. Покажите, что оператор импульса является самосопряженным.
5. Теорема о собственных значениях самосопряженного оператора.
6. Теорема о собственных функциях самосопряженного оператора.
7. Теоремы, связывающие системы собственных функций двух операторов с коммутационными отношениями между ними.
8. Разложение функций в ряд. Представление, базис, представители. Ортогональные и нормированные базисные наборы. Условие нормировки волновой функции, разложенной в ряд. Выражение для определения коэффициента c_i разложения функции ψ в ряд по собственным функциям φ_i самосопряженного оператора.
9. Представление операторов в матричной форме. Вид оператора в собственном представлении. Как будет выглядеть оператор \hat{B} в \hat{A} представлении, если $[\hat{B}, \hat{A}] = 0$?
10. Получите стационарное уравнение Шредингера, исходя из уравнения Максвелла для распространения световой волны. Какое допущение при этом придется сделать?
11. Постулаты квантовой механики. Вероятностное толкование волновой функции. Почему $\int \Psi^* \Psi d\tau = 1$?
12. Постулаты квантовой механики. Способ описания наблюдаемых в квантовой механике величин. Операторы координаты, импульса, потенциальной энергии. Стационарное уравнение Шредингера.
13. Постулаты квантовой механики. Возможные значения, получаемые при измерении физической величины. Точное и среднее значение.
14. Постулаты квантовой механики. Соотношение неопределенностей как следствие постулатов. Теорема о собственных функциях коммутирующих операторов.
15. Соотношение неопределенностей Гейзенберга.
16. Частица в потенциальном ящике. Трехмерный случай: разделение переменных.
17. Частица в потенциальном ящике. Одномерная потенциальная яма. Граничные условия. Квантование энергии.
18. Частица в потенциальном ящике. Одномерная потенциальная яма, качественные результаты: Как меняется расстояние между уровнями по мере роста n ? Как меняется расстояние между уровнями с увеличением ширины ямы? Как меняется энергия основного состояния при уменьшении ширины ямы?
19. Частица в потенциальном ящике. Трехмерный случай: вырождение уровней.
20. Водородоподобный атом. Постановка задачи. Отделение переменных, связанных с движением ядер. Разделение пространственных переменных. Вид лапласиана в сферических координатах можно получить у экзаменатора.
21. Энергия и квантовые числа водородоподобных атомов. Вид волновых функций водородоподобных атомов. Различные способы представления радиальной зависимости.
22. Основная теорема вариационного метода.
23. Общая идея вариационного метода. Вариационный метод Ритца: формулировка задачи.

24. Вариационный метод Ритца: от уравнения Шредингера – к вековому уравнению.
25. Основная идея теории возмущений. Невозмущенная система, возмущение, поправки. Вывод уравнений для нахождения поправок первого и второго порядков.
26. Теория возмущений: определение поправок первого порядка к энергии в отсутствие вырождения.
27. Теория возмущений: определение поправок первого порядка к волновой функции в отсутствие вырождения.
28. Теория возмущений: определение поправок первого порядка к энергии при наличии вырождения. Снятие вырождения.
29. Уравнение Шредингера для молекулы водорода. Приближение Борна-Оппенгеймера. Электронное уравнение Шредингера для молекулы водорода.
30. Рассмотрение молекулы водорода по Гайтлеру–Лондону: постановка задачи, невозмущенная система, оператор возмущения. Вид волновой функции. Принцип тождественности частиц.
31. Рассмотрение молекулы водорода по Гайтлеру–Лондону: вековое уравнение, физический смысл входящих в него интегралов.
32. Рассмотрение молекулы водорода по Гайтлеру–Лондону: основные результаты. Симметричная и антисимметричная пространственные волновые функции, зависимость энергии соответствующих состояний от расстояния между ядрами.
33. Рассмотрение молекулы водорода по Гайтлеру–Лондону: учет спина. Принцип Паули.
34. Понятие спина. Волновая функция системы тождественных частиц. Бозоны и фермионы. Принцип Паули. Определитель Слэйтера.
35. Момент импульса. Оператор момента импульса. Оператор квадрата углового момента. Коммутационные соотношения. Почему при ненулевой величине углового момента его вектор не может быть направлен вдоль выделенной оси z ?
36. Спиновый момент электрона. Собственные функции и собственные значения \mathcal{S}^2 и \mathcal{S}_z^2 .
37. Матрицы Паули. Спиновые состояния системы двух электронов.
38. Метод ВС. Волновая функция молекулы водорода в методе ВС.
39. Метод ВС. Молекулы N_2 , H_2O , BeH_2 . Валентное состояние атома.
40. Метод ВС. Концепция гибридизации. Концепция резонанса. Канонические структуры. Правило Румера. Ионные структуры.
41. Метод Хартри: Одноэлектронное приближение, вид волновой функции, выражение для энергии. Метод самосогласованного поля.
42. Приближения метода МО ЛКАО.
43. Рассмотрение молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Понятие орбитали. Энергия и вид связывающих и разрыхляющих МО.
44. Рассмотрение молекулы водорода: сравнение результатов методов МО и ВС.
45. Гетероядерные двухатомные молекулы в методе МО. Зависимость энергии взаимодействия от «расстояния» между взаимодействующими АО и полярность образующейся связи.
46. Введение π -приближения на примере молекулы этилена: разделение общей задачи на подзадачи о σ - и π -электронах.

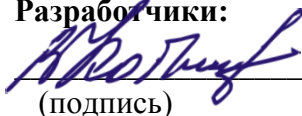
47. Основные приближения метода Хюккеля. Рассмотрение молекулы этилена по методу Хюккеля.
48. Рассмотрение молекулы бутадиена по методу Хюккеля. Энергия делокализации.
49. Рассмотрение молекулы бутадиена по методу Хюккеля. Заряды на атомах и порядки связей.
50. Рассмотрение аллильной системы $[\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2]$ в рамках метода Хюккеля. Несвязывающие МО. Распределение зарядов в аллильном катионе и аллильном анионе.
51. Диаграммы Фроста для линейных полиенов. Рассчитать энергию делокализации в молекуле октатетраена $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$. (Можно воспользоваться ПК экзаменатора)
52. Диаграммы Фроста для циклических полиенов. Ароматичность. Правило Хюккеля.
53. Рассмотрение молекулы циклобутадиена по методу Хюккеля. Антиароматичность.
54. Рассмотрение молекулы бензола по методу Хюккеля. Ароматичность.
55. Введение гетероатомов в теорию Хюккеля. Распределение электронной плотности в молекуле формальдегида $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$.
56. Матричная форма уравнения Шредингера на примере молекулы бутадиена. Покажите, что матрица собственных векторов приводит хюккелевскую матрицу \mathbf{h} к диагональному виду.
57. Параметры метода Хюккеля. Введение гетероатомов. Различные способы оценки параметров α и β . Расширенный метод Хюккеля. Полуэмпирические методы.

Задачи:

58. Каков результат действия оператора $\frac{d^2}{dx^2}$ на функцию $\sin(ax)$? на функцию $\cos(ax)$?
59. Будет ли функция $c_1 \sin(ax) + c_2 \cos(ax)$ собственной функцией оператора $\frac{d^2}{dx^2}$?
60. Линеен ли оператор $\mathcal{K}f(x) = f^2(x)$?
61. Вычислить $\left[\frac{\partial}{\partial x}, y \right]$.
62. Вычислить $\left[\frac{\partial}{\partial x}, x \right]$.
63. Вычислить $\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x \right]$.
64. Частица находится в состоянии $\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + c_3\varphi_3 + c_4\varphi_4 + c_5\varphi_5$, где φ_i – собственные функции оператора физической величины L ($\mathcal{E}\varphi_i = \lambda_i\varphi_i$). Какова вероятность того, что при измерении величины L будет получено значение λ_1 ?
65. Вычислите $\sum_{n=1}^5 a_n \delta_{2n}$. Запишите общее решение для $\sum_k a_k \delta_{mk} =$
66. Используя матрицы Паули, покажите, что $\mathcal{E}^2 \alpha = \frac{3}{4} \hbar^2 \alpha$.

67. Используя определитель Слейтера, запишите волновую функцию для атома лития в состоянии $1s^2 2s^1$. Учтите, что $2s$ -электрон может с равной вероятностью иметь как α , так и β спин.
68. Покажите, что два $1s$ -электрона атома лития не могут иметь одинаковых спинов.
69. Покажите, что $\overline{s^2} = \iint \beta^*(1)\beta^*(2) \mathcal{E}^2 \beta(1)\beta(2) d\tau_1 d\tau_2 = 2\hbar^2$.
70. Покажите, что $\overline{s^2} = \iint \beta^*(1)\alpha^*(2) \mathcal{E}^2 \beta(1)\alpha(2) d\tau_1 d\tau_2 = \hbar^2$.
71. Постройте схему МО для молекулы He_2 . Почему такая молекула неустойчива? Будет ли устойчив ион He_2^+ ?
72. Постройте схему МО молекулы N_2 . Каков порядок связи в этой молекуле? Как изменится длина связи при переходе от N_2 к N_2^+ ?
73. Постройте схему МО молекулы O_2 . Почему молекула кислорода парамагнитна? Каков порядок связи в этой молекуле? Как изменится длина связи при переходе от O_2 к O_2^+ ?
74. Известно, что энергия связи уменьшается в ряду $\text{N}_2 > \text{O}_2 > \text{F}_2$ (225, 118 и 37 ккал/моль, соответственно). Объясните эту закономерность.
75. Постройте схему МО молекулы LiH ($\text{ПИ}_{\text{Li}} = 5,4$ эВ; $\text{ПИ}_{\text{H}} = 13,6$ эВ). Как распределена в этой молекуле электронная плотность?
76. Постройте схему МО молекулы HF ($\text{ПИ}_{\text{F}} = 17,4$ эВ). Как распределена в этой молекуле электронная плотность?
77. Какая из молекул более полярна: LiF или HF ? Почему?
78. Запишите хюккелевский определитель для молекулы пиридина.
79. Запишите хюккелевский определитель для молекулы пиррола.
80. Запишите хюккелевский определитель для молекулы дивинилового эфира.
81. Запишите хюккелевский определитель для молекулы акролеина $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CHO}$.
82. Запишите хюккелевский определитель для молекулы фурана.
83. Запишите хюккелевский определитель для молекулы нафталина.

Разработчики:


(подпись)

профессор
(занимаемая должность)

В.Б. Кобычев
(инициалы, фамилия)

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению и профилю подготовки 04.03.01 – «Химия».

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии
«12» мая 2021 г.

Протокол № 6

Зав. кафедрой



А.Ф. Шмидт /

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.