

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина»
Институт естествознания
Кафедра химии

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института



Е. В. Скрипникова
«05» июля 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

по дисциплине Б1.В.ДВ.04.2 Квантовая механика и квантовая химия

Направление подготовки/специальность: 04.04.01 - Химия

Профиль/направленность/специализация: Электрохимия

Уровень высшего образования: магистратура

Квалификация: Магистр

год набора: 2021

Тамбов, 2022

Автор программы:

Доктор химических наук, доцент Таныгина Елена Дмитриевна

Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 - Химия (уровень магистратуры) (приказ Министерства образования и науки РФ от «13» июля 2017 г. № 655).

Рабочая программа принята на заседании Кафедры химии «17» июня 2021 г. Протокол № 8

Рассмотрена и одобрена на заседании Ученого совета Института естествознания, Протокол от «05» июля 2021 г. № 10.

СОДЕРЖАНИЕ

1. Цели и задачи дисциплины.....	4
2. Место дисциплины в структуре ОП Магистра.....	5
3. Объем и содержание дисциплины.....	5
4. Контроль знаний обучающихся и типовые оценочные средства.....	7
5. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля).....	9
6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.....	11
7. Материально-техническое обеспечение дисциплины, программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы.....	11

1. Цели и задачи дисциплины

1.1 Цель дисциплины – формирование компетенций:

ПК-4 Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты

1.2 Типы задач профессиональной деятельности, к которым готовятся обучающиеся в рамках освоения дисциплины:

- научно-исследовательский

1.3 Дисциплина ориентирована на подготовку обучающихся к профессиональной деятельности в сферах: 26 Химическое, химико-технологическое производство (в сфере оптимизации существующих и разработки новых технологий, методов и методик получения и анализа продукции, в сфере контроля качества сырья, полуфабрикатов и готовой продукции, в сфере паспортизации и сертификации продукции), 40 Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере нацеленных, опытно-конструкторских разработок и внедрения химической продукции различного назначения, в сфере метрологии сертификации и технического контроля качества продукции)

1.4 В результате освоения дисциплины у обучающихся должны быть сформированы:

Обобщенные трудовые функции / трудовые функции / трудовые или профессиональные действия (при наличии профстандарта)	Код и наименование компетенции ФГОС ВО, необходимой для формирования трудового или профессионального действия	Индикаторы достижения компетенций
	ПК-4 Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	Выдвигает гипотезы и строит модели, применяет полученные знания для объяснения разнообразных химических и физических явлений и свойств веществ

1.5 Согласование междисциплинарных связей дисциплин, обеспечивающих освоение компетенций:

ПК-4 Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты

№ п/п	Наименование дисциплин, определяющих междисциплинарные связи	Форма обучения		
		Очно-заочная (семестр)		
		3	4	5
1	Актуальные задачи современной химии		+	
2	Научно-исследовательская работа		+	
3	Планирование научных исследований	+		

4	Преддипломная практика			+
5	Теоретическая электрохимия		+	
6	Теория электролитов	+		
7	Физическая химия сверхкритических флюидов		+	
8	Электрические явления на поверхности раздела фаз	+		
9	Электрохимические методы исследования процессов и материалов	+		

2. Место дисциплины в структуре ОП магистратуры:

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, учебного плана ОП по направлению подготовки 04.04.01 - Химия.

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия» изучается в 4 семестре.

3. Объем и содержание дисциплины

3.1. Объем дисциплины: 2 з.е.

Очно-заочная: 2 з.е.

Вид учебной работы	Очно-заочная (всего часов)
Общая трудоёмкость дисциплины	72
Контактная работа	10
Лекции (Лекции)	4
Практические (Практ. раб.)	6
Самостоятельная работа (СР)	62
Зачет	-

3.2. Содержание курса:

№ темы	Название раздела/темы	Вид учебной работы, час.			Формы текущего контроля
		Лек ции	Пра кт. раб.	СР	
		О-3	О-3	О-3	
4 семестр					
1	Классическая механика. Динамические и статистические законо-мерности. Основные понятия теории вероятности	1	1	15	Научный доклад

2	Предпосылки возникновения квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики	1	1	15	Научный доклад; Опрос
3	Операторы квантовой механики. Основы квантовой механики	1	2	16	Научный доклад
4	Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой меха	1	2	16	Научный доклад; Опрос

Тема 1. Классическая механика. Динамические и статистические закономерности. Основные понятия теории вероятности (ПК-4)

Лекция.

Динамические переменные и задание состояния. Операторы динамических переменных. Оператор кинетической энергии T . Оператор момента импульса M . Оператор квадрата момента импульса M^2 . Оператор Гамильтона (гамильтониан) H точки. Гамильтониан системы частиц. Оператор спина. Статистический смысл волновой функции. Свойства волновой функции. Вычисление вероятностей результатов измерения. Условия возможности одновременного измерения разных физических величин.

Практическое занятие.

Свойства волновой функции. Вычисление вероятностей результатов измерения. Условия возможности одновременного измерения разных физических величин.

Задания для самостоятельной работы.

Соотношение неопределенностей.
Координата x и соответствующий ей импульс p_x

Тема 2. Предпосылки возникновения квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики (ПК-4)

Лекция.

Изменение состояния во времени.
Уравнение Шредингера в матричной форме.
Вектор тока вероятностей для частицы.

Практическое занятие.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний в матричной форме.

Задания для самостоятельной работы.

Волновая функция для постоянных во времени полей.
Стационарные состояния.

Тема 3. Операторы квантовой механики. Основы квантовой механики (ПК-4)

Лекция.

Типы квантовых орбиталей. Вырождение энергетических уровней.

Практическое занятие.

Квантовые числа. Движение частиц в кулоновском поле

Задания для самостоятельной работы.

Уравнение Шредингера в матричной форме.

Вектор тока вероятностей для частицы

Тема 4. Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой меха (ПК-4)

Лекция.

Сущность метода теории возмущений.

Возмущение в отсутствие вырождения невозмущенной задачи.

Возмущение при наличии вырождения невозмущенного состояния.

Расщепление энергетических уровней атома водорода в электрическом поле.

Практическое занятие.

Нестационарная теория возмущений.

Явление квантового перехода.

Квантовые переходы под влияние световой волны.

Задания для самостоятельной работы.

Правила отбора для электронов в атоме.

Интеркомбинационный запрет.

4. Контроль знаний обучающихся и типовые оценочные средства

4.1. Распределение баллов:

Балльно-рейтинговые мероприятия не предусмотрены

4.2 Типовые оценочные средства текущего контроля

Научный доклад

Тема 1. Классическая механика. Динамические и статистические закономерности. Основные понятия теории вероятности

1. Динамические переменные и задание состояния.
2. Операторы динамических переменных.
3. Оператор кинетической энергии T .
4. Оператор момента импульса M .
5. Оператор квадрата момента импульса M^2 .
6. Оператор Гамильтона (гамильтониан) H точки.
7. Гамильтониан системы частиц.
8. Оператор спина.
9. Основные законы квантовой механики.
10. Статистический смысл волновой функции.
11. Свойства волновой функции.
12. Вычисление вероятностей результатов измерения.
13. Условия возможности одновременного измерения разных физических величин.
14. Соотношение неопределенностей.
15. Координата x и соответствующий ей импульс p_x .

Тема 2. Предпосылки возникновения квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики

1. Изменение состояния во времени.
2. Уравнение Шредингера в матричной форме.
3. Вектор тока вероятностей для частицы.
4. Волновая функция для постоянных во времени полей.
5. Стационарные состояния.
6. Уравнение Шредингера для стационарных состояний в матричной форме.

Тема 3. Операторы квантовой механики. Основы квантовой механики

1. Типы квантовых орбиталей.
2. Вырождение энергетических уровней.
3. Квантовые числа.
4. Движение частиц в кулоновском поле.

Тема 4. Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой меха

1. Сущность метода теории возмущений.
2. Возмущение в отсутствие вырождения невозмущенной задачи.
3. Возмущение при наличии вырождения невозмущенного состояния.
4. Расщепление энергетических уровней атома водорода в электрическом поле.
5. Нестационарная теория возмущений.
6. Явление квантового перехода.
7. Квантовые переходы под влияние световой волны.
8. Правила отбора для электронов в атоме.
9. Интеркомбинационный запрет.

Опрос

Тема 2. Предпосылки возникновения квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики

1. Исходные положения квантовой механики
2. Центральное поле и момент количества движения
3. Приближенные методы решения задач квантовой механики

Тема 4. Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой меха

1. Моменты системы частиц.
2. Разделение движения ядер и электронов в молекулах.
3. Вариационный принцип.
4. Самосогласованное поле.
5. Уравнение Хартри.
6. Последовательные приближения.
7. Волновая функция системы тождественных частиц.
8. Антисимметризация волновой функции.
9. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении.

4.3 Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета

Типовые вопросы зачета (ПК-4)

Типовые вопросы зачета

1. Механика Ньютона. Законы Ньютона. Основные характеристики классической механики: энергия, импульс, момент импульса.
2. Потенциальная функция и кинетическая энергия. Системы координат. Механика Лагранжа и Гамильтона. Функция Гамильтона.
3. Область существования динамики и статистических закономерностей. Статистическая закономерность в квантовой механике.
4. Статистическое определение вероятности. Теорема сложения и умножения вероятностей. Функция распределения. Коэффициент нормировки.

Типовые задания для зачета (ПК-4)

1. Правила отбора для электронов в атоме. Интеркомбинационный запрет.
2. Моменты системы частиц. Разделение движения ядер и электронов в молекулах.
3. Вариационный принцип.
4. Самосогласованное поле. Уравнение Хартри.
5. Самосогласованное поле. Последовательные приближения.
6. Волновая функция системы тождественных частиц. Антисимметризация волновой функции.

4.4. Шкала оценивания промежуточной аттестации

Оценка	Компетенции	Дескрипторы (уровни) – основные признаки освоения (показатели достижения результата)
«зачтено»	ПК-4	Интерпретирует разнообразные химические и физические явления и свойства веществ на основе выдвигаемых моделей
«не зачтено»	ПК-4	Затрудняется при анализе разнообразных химических и физических явлений и свойств веществ на основе выдвигаемых моделей.

5. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

5.1 Методические указания по организации самостоятельной работы обучающихся:

Приступая к изучению дисциплины, в первую очередь обучающимся необходимо ознакомиться содержанием рабочей программы дисциплины (РПД), которая определяет содержание, объем, а также порядок изучения и преподавания учебной дисциплины, ее раздела, части.

Для самостоятельной работы важное значение имеют разделы «Объем и содержание дисциплины», «Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины» и «Материально-техническое обеспечение дисциплины, программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы».

В разделе «Объем и содержание дисциплины» указываются все разделы и темы изучаемой дисциплины, а также виды занятий и планируемый объем в академических часах.

В разделе «Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины» указана рекомендуемая основная и дополнительная литература.

В разделе «Материально-техническое обеспечение дисциплины, программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы» содержится перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем, необходимых для освоения дисциплины.

5.2 Рекомендации обучающимся по работе с теоретическими материалами по дисциплине

При изучении и проработке теоретического материала необходимо:

- просмотреть еще раз презентацию лекции в системе MOODLe, повторить законспектированный на лекционном занятии материал и дополнить его с учетом рекомендованной дополнительной литературы;

- при самостоятельном изучении теоретической темы сделать конспект, используя рекомендованные в РПД источники, профессиональные базы данных и информационные справочные системы;
- ответить на вопросы для самостоятельной работы, по теме представленные в пункте 3.2 РПД.
- при подготовке к текущему контролю использовать материалы фонда оценочных средств (ФОС).

5.3 Рекомендации по работе с научной и учебной литературой

Работа с основной и дополнительной литературой является главной формой самостоятельной работы и необходима при подготовке к устному опросу на семинарских занятиях, к дебатам, тестированию, экзамену. Она включает проработку лекционного материала и рекомендованных источников и литературы по тематике лекций.

Конспект лекции должен содержать реферативную запись основных вопросов лекции, в том числе с опорой на размещенные в системе MOODLe презентации, основных источников и литературы по темам, выводы по каждому вопросу. Конспект может быть выполнен в рамках распечатки выдачи презентаций лекций или в отдельной тетради по предмету. Он должен быть аккуратным, хорошо читаемым, не содержать не относящуюся к теме информацию или рисунки.

Конспекты научной литературы при самостоятельной подготовке к занятиям должны содержать ответы на каждый поставленный в теме вопрос, иметь ссылку на источник информации с обязательным указанием автора, названия и года издания используемой научной литературы. Конспект может быть опорным (содержать лишь основные ключевые позиции), но при этом позволяющим дать полный ответ по вопросу, может быть подробным. Объем конспекта определяется самим студентом.

В процессе работы с основной и дополнительной литературой студент может:

- делать записи по ходу чтения в виде простого или развернутого плана (создавать перечень основных вопросов, рассмотренных в источнике);
- составлять тезисы (цитирование наиболее важных мест статьи или монографии, короткое изложение основных мыслей автора);
- готовить аннотации (краткое обобщение основных вопросов работы);
- создавать конспекты (развернутые тезисы).

5.4. Рекомендации по подготовке к отдельным заданиям текущего контроля

Собеседование предполагает организацию беседы преподавателя со студентами по вопросам практического занятия с целью более обстоятельного выявления их знаний по определенному разделу, теме, проблеме и т.п. Все члены группы могут участвовать в обсуждении, добавлять информацию, дискутировать, задавать вопросы и т.д.

Устный опрос может применяться в различных формах: фронтальный, индивидуальный, комбинированный. Основные качества устного ответа подлежащего оценке:

- правильность ответа по содержанию;
- полнота и глубина ответа;
- сознательность ответа;
- логика изложения материала;
- рациональность использованных приемов и способов решения поставленной учебной задачи;
- своевременность и эффективность использования наглядных пособий и технических средств при ответе;
- использование дополнительного материала;
- рациональность использования времени, отведенного на задание.

Устный опрос может сопровождаться презентацией, которая подготавливается по одному из вопросов практического занятия. При выступлении с презентацией необходимо обращать внимание на такие моменты как:

- содержание презентации: актуальность темы, полнота ее раскрытия, смысловое содержание, соответствие заявленной темы содержанию, соответствие методическим требованиям (цели, ссылки на ресурсы, соответствие содержания и литературы), практическая направленность, соответствие содержания заявленной форме, адекватность использования технических средств учебным задачам, последовательность и логичность презентуемого материала;

- оформление презентации: объем (оптимальное количество), дизайн (читаемость, наличие и соответствие графики и анимации, звуковое оформление, структурирование информации, соответствие заявленным требованиям), оригинальность оформления, эстетика, использование возможности программной среды, соответствие стандартам оформления;
- личностные качества: ораторские способности. соблюдение регламента, эмоциональность, умение ответить на вопросы, систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам программы:
- содержание выступления: логичность изложения материала, раскрытие темы, доступность изложения, эффективность применения средств ИКТ, способы и условия достижения результативности и эффективности для выполнения задач своей профессиональной или учебной деятельности, доказательность принимаемых решений, умение аргументировать свои заключения, выводы.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

6.1 Основная литература:

1. Ермаков А. И. Квантовая механика и квантовая химия : Учебник и практикум Для академического бакалавриата. - Москва: Юрайт, 2017. - 555 с. - Текст : электронный // ЭБС «ЮРАЙТ» [сайт]. - URL: <https://urait.ru/bcode/402514>

6.2 Дополнительная литература:

1. Крашенинин В. И., Газенаур Е. Г., Кузьмина Л. В. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам : учебное пособие. - Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. - 56 с. - Текст : электронный // ЭБС «Университетская библиотека онлайн» [сайт]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>
2. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие для вузов. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2010. - 496 с.
3. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие. - 2-е изд., испр. и доп.. - Санкт-Петербург, Москва, Краснодар, 2017. - 426 с.

6.3 Иные источники:

1. Интернет-энциклопедии - <http://www.rubicon.com/>
2. Электронная версия «Социологического журнала», издаваемого Российской академией наук Институтом социологии РАН - www.nir.ru/socio/scipubl/socjour.htm

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины, программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Для проведения занятий по дисциплине необходимо следующее материально-техническое обеспечение: учебные аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, помещения для самостоятельной работы.

Учебные аудитории и помещения для самостоятельной работы укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы укомплектованы компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду Университета.

Для проведения занятий лекционного типа используются наборы демонстрационного оборудования, обеспечивающие тематические иллюстрации (проектор, ноутбук, экран/ интерактивная доска).

Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный Russian Edition. 1500-2499 Node 1 year Educational Renewal Licence

Операционная система Microsoft Windows 10

Adobe Reader XI (11.0.08) - Russian Adobe Systems Incorporated 10.11.2014 187,00 МВ 11.0.08

Microsoft Office Профессиональный плюс 2007

7-Zip 9.20

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

1. Научная электронная библиотека Российской академии естествознания. – URL: <https://www.monographies.ru>
2. Электронный каталог Фундаментальной библиотеки ТГУ. – URL: <http://biblio.tsutmb.ru/elektronnyij-katalog>
3. Университетская библиотека онлайн: электронно-библиотечная система. – URL: <https://biblioclub.ru>

Электронная информационно-образовательная среда

https://auth.tsutmb.ru/authorize?response_type=code&client_id=moodle&state=xyz

Взаимодействие преподавателя и студента в процессе обучения осуществляется посредством мультимедийных, гипертекстовых, сетевых, телекоммуникационных технологий, используемых в электронной информационно-образовательной среде университета.