

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого»

Институт электронных и информационных систем
Кафедра физики твердого тела и микроэлектроники



УТВЕРЖДАЮ

Директор ИЭИС, профессор

Б.И.Селезнев

« 02 » 09 2014 г.

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Дисциплина для специальности 020201.65– Фундаментальная и прикладная химия

Рабочая программа

СОГЛАСОВАНО

Начальник УМУ

Е.И.Грошев

« 02 » 09 2014 г.

Разработал

Профессор кафедры ФТТМ

М.А.Захаров

« 20 » 05 2014 г.

Зав. кафедрой ФПХ

И.В.Зыкова

« 03 » 06 2014 г.

Принято на заседании кафедры ФТТМ

Протокол № 9 от 22.05 2014 г.

Заведующий кафедрой ФТТМ

Б.И.Селезнев

« 22 » 05 2014 г.

ВВЕДЕНИЕ

«Квантовая химия» относится к базовой части профессионального цикла дисциплин Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования по специальности 020201.65– Фундаментальная и прикладная химия.

1 Цели освоения дисциплины

Цель дисциплины «Квантовая химия» – формирование компетентности студентов в области квантовой механики и квантовой химии, способствующей становлению их готовности к решению задач профессиональной деятельности.

Комплексные цели освоения дисциплины: формирование у студентов фундаментальных представлений об основных понятиях и методах квантовой механики и квантовой химии.

Основные задачи:

- изучение основных постулатов и принципов квантовой механики и квантовой химии;
- изучение математического аппарата квантовой механики и квантовой химии;
- изучение основных приближенных методов решения квантовомеханических задач;
- подготовить студентов к активному использованию приобретенных знаний и умений в области квантовой механики как при изучении смежных дисциплин подготовки специалиста, так и в своей дальнейшей профессиональной деятельности.

Ведущая идея дисциплины – квантовая химия имеет фундаментальное значение для понимания поведения и исследования свойств микроскопических систем, объектов и природы химической связи.

2 Место дисциплины в структуре ООП специальности 020201.65– Фундаментальная и прикладная химия.

Дисциплина «Квантовая химия» относится к базовой части профессионального цикла дисциплин Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования по специальности 020201.65– Фундаментальная и прикладная химия.

Изучение дисциплины базируется на знаниях, полученных при изучении физики, математики, физической химии и изучается в восьмом семестре.

В результате освоения предшествующих дисциплин и для изучения дисциплины «Квантовая химия» студенты должны:

знать/понимать:

- основные законы, определения и понятия классической физики и физической химии;
- основные физические явления, их суть и интерпретация;
- алгоритмы решения физических задач.

уметь:

- интерпретировать наблюдаемые простейшие явления природы, на основе известных физических теорий.

владеть:

- аппаратом дифференциального и интегрального исчислений;
- методиками решения типовых физических задач;
- методиками проведения физических измерений.

Приобретенные знания и умения в результате освоения дисциплины «Квантовая химия», как предшествующей, обеспечивают изучение последующих дисциплин, входящих в базовую и вариативную части профессионального цикла по специальности 020201.65– Фундаментальная и прикладная химия.

3 Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины «Квантовая химия» направлен на формирование следующих компетенций:

умением логически верно, аргументированно и ясно строить устную и письменную речь, владением развитой письменной и устной коммуникацией, включая иноязычную культуру (ОК-6);

владением одним из иностранных языков (преимущественно английским) на уровне чтения научной литературы и навыков разговорной речи (ОК-7);

умением работать с компьютером на уровне пользователя и способностью применять навыки работы с компьютерами как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности (ОК-8);

владением основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, наличием навыков работы с компьютером, как средством управления информацией (ОК-10);

пониманием роли естественных наук (химии в том числе) в выработке научного мировоззрения (ПК-2);

способностью использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук (ПК-3);

использованием основных законов естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применением методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ПК-4);

знанием основ теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, химии биологических объектов, химической технологии) (ПК-11);

В результате освоения дисциплины «Квантовая химия» студент должен:

знать

- основные принципы квантовой механики и квантовой химии;
- основные понятия квантовой механики и квантовой химии;
- свойства собственных функций операторов, имеющих дискретный спектр;
- свойства собственных функций операторов, имеющих непрерывный спектр;
- элементарную теорию представлений;
- особенности движения частицы в поле сферической симметрии;
- приближенные методы вычисления собственных значений и собственных функций операторов;
- основы квантовой теории многочастичных систем;
- метод Хартри-Фока, метод Томаса-Ферми и другие приближенные методы расчета многочастичных систем;
- правила классификации атомных термов;
- основы теории химической связи;
- теорию гибридизации;

уметь применять полученные знания для решения конкретных задач в рамках данной дисциплины;

владеть

– основными математическими методами нерелятивистской квантовой механики и квантовой химии;

– методикой физически интерпретировать результаты расчетов квантовомеханических характеристик микроскопических систем.

4 Структура и содержание дисциплины «Квантовая химия»

4.1 Трудоемкость дисциплины и формы аттестации

Учебная работа (УР)	Распределение по семестрам	Коды формируемых компетенций
	8 сем.	
Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах (ЗЕ)	4	
Распределение трудоемкости по видам УР в академических часах (АЧ):	144	
- лекции	18	ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-10, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-11
- практические занятия	36	
- аудиторная СРС	18	
- внеаудиторная СРС	54	
Аттестация:		
- экзамен	36	

4.2 Содержание и структура разделов дисциплины

Раздел 1. Волновая функция, ее основные свойства и принцип суперпозиции состояний.

Лекция №1

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.

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.

Лекция №2

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.

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.

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. Предельный переход к движению частицы в неограниченном объеме пространства.

Раздел 2. Операторы физических величин.

Лекция №3

Вычисление средних значений координаты и импульса. Операторы физических величин. Линейные операторы и их свойства. Понятие эрмитовых или самосопряженных операторов. Самосопряженность операторов физических величин как следствие условия действительности средних значений физических величин. Операторы координаты и импульса, а также соответствующих проекций в координатном представлении.

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.

Лекция №4

Спектр оператора, понятие дискретного и непрерывного спектров, квантовые числа. Вырождение, кратность вырождения. Действительность собственных чисел самосопряженных операторов. Вычисление собственных значений и собственных функций оператора проекции импульса. Вычисление собственных значений и собственных функций оператора проекции углового момента, сферическая система координат. Вычисление собственных значений и собственных функций оператора квадрата углового момента, орбитальные и магнитные квантовые числа.

Свойства собственных функций операторов, имеющих дискретный спектр. Ортогональность собственных функций, относящихся к различным собственным значениям самосопряженного оператора. Физический смысл ортогональности собственных функций. Представление совокупности собственных функций оператора, имеющего дискретный спектр, как системы ортонормированных функций. Свойства собственных функций при наличии вырождения, процедура ортогонализации. Условие полноты собственных функций. Свойства собственных функций операторов, имеющих непрерывный спектр. Нормировка на дельта-функцию. Примеры.

Раздел 3. Принцип неопределенности Гайзенберга.

Лекция №5

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 Гайзенберга, канонически сопряженные величины в классической механике и дополнительные величины в квантовой механике. Принцип дополнительности Бора.

Раздел 4. Волновое и стационарное уравнения Шредингера.

Лекция №6

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. Факторизация волновой функции. Координатная и временная части волновой функции. Стационарное уравнение Шредингера и его физический смысл. Стационарное уравнение Шредингера как задача Штурма-Лиувилля. Свойства стационарных состояний.

Изменение средних значений физических величин с течением времени. Интеграл квантовых уравнений движения. Условие перехода от уравнения Шредингера к классическим уравнениям движения.

Лекция №7

Предельный переход от квантовой механики к классической. Уравнение Гамильтона-Якоби и функция действия. Три условия предельного перехода. Квазиклассическое приближение (метод Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна [ВКБ]). Классически допустимая область движения, точки поворота и классически недопустимые области движения. Импульс и квазиимпульс.

Правило квантования Бора--Зоммерфельда и условие его применимости. Использование правила квантования Бора--Зоммерфельда для приближенного расчета уровней гармонического осциллятора.

Лекция №8

Прохождение частицы через потенциальный барьер. Движение частицы над потенциальным барьером и потенциальной ямой. Коэффициенты прохождения и отражения. Примеры.

Лекция №9

Гармонический осциллятор. Метод вторичного квантования. Операторы рождения и уничтожения, оператор числа частиц и перестановочные соотношения для них. Уровни энергии гармонического осциллятора. Трехмерный гармонический осциллятор.

Раздел 5. Движение частиц в сферически симметричных полях.

Лекция №10

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.

Лекция №11

Движение в кулоновском поле. Случай дискретного спектра. Случай непрерывного спектра. Радиальные волновые функции водорода. Атомные орбитали водородоподобного атома.

Раздел 6. Приближенные методы квантовой химии.

Лекция №12

Теория возмущений в стационарных состояниях с дискретным спектром. Оператор возмущения. Условия применимости теории возмущения.

Теория возмущений при наличии двух близких уровней. «Отталкивание» уровней. Теория возмущений при наличии вырождения. Секулярное уравнение.

Лекция №13

Вариационные методы нахождения собственных чисел и собственных функций операторов. Пробные функции. Вариационные параметры. Прямой и обратный вариационные методы.

Раздел 7. Ансамбли квантовых частиц и методы их описания.

Лекция №14

Уравнение Шредингера для системы, состоящей из одинаковых частиц. Приближение независимых частиц. Приближение свободных частиц.

Оператор перестановки. Симметричные и антисимметричные волновые функции. Принцип неразличимости одинаковых частиц. Фермионы и бозоны. Принцип Паули. Детерминант Слэйттера. Схемы Юнга.

Лекция №15

Элементарная теория основного состояния гелиоподобных атомов. Энергия ионизации. Эффективный заряд ядра.

Возбужденные состояния атома гелия. Кулоновский и обменный интегралы. Обменная энергия. Синглетные и триплетные уровни. Орто- и парагелий.

Раздел 8. Приближенные методы Хартри-Фока и Томаса-Ферми.

Лекция №16

Метод Хартри. Самосогласованное поле Хартри. Метод Хартри-Фока. Примеры расчетов.

Лекция №17

Статистический метод Томаса-Ферми. Уравнение Томаса-Ферми в безразмерных переменных. Применение метода Томаса-Ферми к нейтральным атомам и ионам.

Лекция №18

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.

Календарный план, наименование разделов дисциплины с указанием трудоемкости по видам учебной работы представлены в технологической карте дисциплины (Приложение Б).

4.3 Организация изучения дисциплины

Методические рекомендации по организации изучения дисциплины с учетом использования в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения учебных занятий даются в Приложении А.

5 Контроль и оценка качества освоения дисциплины

Контроль качества освоения студентами дисциплины и ее составляющих осуществляется непрерывно в течение всего периода обучения с использованием балльно-рейтинговой системы (БРС), являющейся обязательной к использованию всеми структурными подразделениями университета.

Для оценки качества освоения дисциплины используются формы контроля: текущий – регулярно в течение всего семестра и семестровый (экзамен) – по окончании изучения дисциплины.

Максимальное количество баллов, получаемое на экзамене – 50. Максимальное количество баллов по дисциплине – 200.

Оценка качества освоения дисциплины осуществляется с использованием фонда оценочных средств (ФОС), разработанного для данной дисциплины, по всем формам контроля в соответствии с положением от 25.06.2013 № 9 «О фонде оценочных средств для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации студентов и итоговой аттестации». В качестве оценочных средств на протяжении семестра используются: разноуровневые задачи, опросы, контрольная работа и экзамен.

6 Учебно-методическое и информационное обеспечение

Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины представлено Картой учебно-методического обеспечения (Приложение В).

7 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для осуществления образовательного процесса по дисциплине используется лекционная аудитория, оборудованная мультимедийными средствами

Приложения (обязательные):

А – Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Б – Технологическая карта

В – Карта учебно-методического обеспечения дисциплины

Приложение А (обязательное)

Методические рекомендации по организации изучения дисциплины «Квантовая химия»

Дисциплина «Квантовая химия» состоит из взаимосвязанных разделов, по которым предусмотрены лекционные и практические занятия.

В таблице А.1 отражены разделы дисциплины, технологии и формы проведения занятий, задания по самостоятельной работе студента и ссылки на необходимую литературу.

А.1 Методические рекомендации по теоретической части дисциплины

Теоретическая часть дисциплины направлена на формирование системы знаний об основных понятиях и методах квантовой механики и квантовой химии.

Основное содержание теоретической части излагается преподавателем на лекционных занятиях, а также усваивается студентом при знакомстве с дополнительной литературой, которая предназначена для более глубокого овладения знаниями основных дидактических единиц соответствующего раздела и указана в таблице А.1.

Как правило, в начале лекции проводится опрос (не более 20 мин.) для экспресс-оценки уровня усвоения теоретического материала студентами. Опрос состоит из вопросов, полный список которых содержится в Фонде оценочных средств (ФОС) (приложение В) данной дисциплины.

Пример вопросов по разделу 1 Вводная лекция:

1. В опытах Дэвиссона и Джермера были обнаружены:

- а) Дифракция электронов
- б) Поляризация рентгеновских лучей
- в) Эффект Комптона
- г) Корпускулярные свойства света
- д) Линейчатые спектры атомов.

А.2 Методические рекомендации по практическим занятиям

Цель практических занятий – закрепление теоретического материала и выработка у студентов умения решать задачи по практическим аспектам дисциплины.

Практические занятия строятся следующим образом:

- 20% аудиторного времени отводится на объяснение решения типовой задачи у доски;
- 70% аудиторного времени – самостоятельное решение задач студентами;
- 10% аудиторного времени в конце текущего занятия – разбор типовых ошибок при решении задач.

Большинство задач содержится в учебном пособии: Филиппов Д.А. Задачи по квантовой механике/ Д.А.Филиппов, М.А.Захаров; НовГУ им. Ярослава Мудрого. – Великий Новгород, 2010. – 43 с. и в фонде оценочных средств данного учебного модуля (приложение А).

Конкретная форма проведения практических занятий указана в таблице А.1.

А.3 Методические рекомендации по самостоятельной работе студентов

Для подготовки к опросам, контрольной работе и экзамену рекомендуется пользоваться основной и дополнительной учебно-методической литературой, представленной в таблице А.1 и в карте учебно-методического обеспечения.

Для самостоятельной подготовки к экзамену предлагаются контрольные вопросы по дисциплине.

Вопросы к экзамену по дисциплине «Квантовая химия»

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. Вывод перестановочных соотношений для x и p_x , x и p_y , x и y , L_i и L_k , L^2 и L_i .
11. Собственные числа и собственные функции оператора p_x . Собственные числа и собственные функции оператора L_z .
12. Свойства собственных функций операторов, имеющих дискретный спектр.
13. Свойства собственных функций операторов, имеющих непрерывный спектр. Нормировка на δ -функцию.
14. Условия, при которых несколько физических величин могут иметь определенные значения в одном состоянии.
15. Соотношение неопределенности для физических величин.
16. Волновое уравнение Шредингера. Оператор Гамильтона и его смысл. Принцип причинности. Связь с уравнением Гамильтона-Якоби.
17. Уравнение Шредингера как уравнение неразрывности.

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

Пример экзаменационного билета

Министерство науки и образования Российской Федерации
Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого
Институт электронных и информационных систем
Кафедра физики твердого тела и микроэлектроники

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ
по дисциплине «**Квантовая химия**»

1. Условие, при котором две физические величины одновременно могут иметь определенные значения.

2. Метод Хартри-Фока.

3 Задача.

Найдите среднее значение квадрата расстояния электрона от ядра в основном состоянии атома водорода.

Зав. кафедрой ФТТМ

Б.И. Селезнев

Таблица А.1 - Организация изучения дисциплины «Квантовая химия»

Раздел дисциплины	Технология и форма проведения занятий	Задания на СРС	Дополнительная литература и интернет-ресурсы
1. Волновая функция, ее основные свойства и принцип суперпозиции состояний.	информационные лекции	– подготовиться к опросу	1. А.С. Давыдов: Квантовая механика: учебное пособие для вузов. – 3-е изд., стер. –М.: BHV, 2011. http://www.ph4s.ru/book_ph_kv_mex_zad.html
2. Операторы физических величин.	информационная лекция решение задач с обсуждением результатов	– решать задачи (ауд. СРС) – подготовиться к опросу	1. А.С. Давыдов: Квантовая механика: учебное пособие для вузов. – 3-е изд., стер. –М.: BHV, 2011. 2. В.М. Галицкий. Задачи по квантовой механике (в 2 частях): Учебное пособие для вузов.- 3-е изд., испр. и доп. - М.: Едиториал УРСС, 2001. http://www.ph4s.ru/book_ph_kv_mex_zad.html
3. Принцип неопределенности Гейзенберга.	информационная лекция	– подготовиться к опросу	1. А.С. Давыдов: Квантовая механика: учебное пособие для вузов. – 3-е изд., стер. –М.: BHV, 2011. http://www.ph4s.ru/book_ph_kv_mex_zad.html
4. Волновое и стационарное уравнения Шредингера.	информационные лекции решение задач с обсуждением результатов	– решать задачи (ауд. СРС) – подготовиться к опросу	1. А.С. Давыдов: Квантовая механика: учебное пособие для вузов. – 3-е изд., стер. –М.: BHV, 2011. 2. В.М. Галицкий. Задачи по квантовой механике (в 2 частях): Учебное пособие для вузов.- 3-е изд., испр. и доп. - М.: Едиториал УРСС, 2001. http://www.ph4s.ru/book_ph_kv_mex_zad.html
5. Движение частиц в сферически симметричных полях.	– информационные лекции – решение задач с обсуждением результатов	– решать задачи (ауд. СРС) подготовиться к опросу	1. А.С. Давыдов: Квантовая механика: учебное пособие для вузов. – 3-е изд., стер. –М.: BHV, 2011. 2. В.М. Галицкий. Задачи по квантовой механике (в 2 частях): Учебное пособие для вузов.- 3-е изд., испр. и доп. - М.: Едиториал УРСС, 2001. http://www.ph4s.ru/book_ph_kv_mex_zad.html
6. Приближенные методы квантовой химии.	– информационная лекция – решение задач с обсуждением результа-	– решать задачи (ауд. СРС) подготовиться к опросу	1. А.С. Давыдов: Квантовая механика: учебное пособие для вузов. – 3-е изд., стер. –М.: BHV, 2011. 2. В.М. Галицкий. Задачи по квантовой механике (в 2 частях): Учебное пособие для вузов.- 3-е изд., испр. и доп. - М.: Едиториал УРСС, 2001.

Раздел дисциплины	Технология и форма проведения занятий	Задания на СРС	Дополнительная литература и интернет-ресурсы
	тов		http://www.ph4s.ru/book_ph_kv_mex_zad.html
7. Ансамбли квантовых частиц и методы их описания.	– информационные лекции – решение задач с обсуждением результатов	– решать задачи (ауд. СРС) подготовиться к опросу	1. А.С. Давыдов: Квантовая механика: учебное пособие для вузов. – 3-е изд., стер. – М.: БНВ, 2011. 2. В.М. Галицкий. Задачи по квантовой механике (в 2 частях): Учебное пособие для вузов.- 3-е изд., испр. и доп. - М.: Едиториал УРСС, 2001. http://www.ph4s.ru/book_ph_kv_mex_zad.html
8. Приближенные методы Хартри-Фока и Томаса-Ферми.	– информационная лекция – решение задач с обсуждением результатов	– решать задачи (ауд. СРС) подготовиться к опросу	1. А.С. Давыдов: Квантовая механика: учебное пособие для вузов. – 3-е изд., стер. – М.: БНВ, 2011. 2. В.М. Галицкий. Задачи по квантовой механике (в 2 частях): Учебное пособие для вузов.- 3-е изд., испр. и доп. - М.: Едиториал УРСС, 2001. http://www.ph4s.ru/book_ph_kv_mex_zad.html

(обязательное)

дисциплины «Квантовая химия»

семестр – 8, ЗЕ – 4, вид аттестации – экзамен, акад. часов – 144, баллов рейтинга – 200

[illegible]

Номер и наименование раздела дисциплины, КП/КР	№ не- дели сем.	Трудоемкость, ак.час					Форма текущего контроля успеваемости (в соответствии с паспор- том ФОС)	Максим. кол-во бал- лов рейтинга
		Аудиторные занятия				СРС		
		ЛЕК	ПЗ	ЛР	АСРС			
7. Ансамбли квантовых частиц и методы их описа- ния.	14	2	4		2	6	разноуровневые задачи	10
							опрос	5
8. Приближенные методы Хартри-Фока и Томаса- Ферми.	16	3	6		3	9	разноуровневые задачи	10
							опрос	5
Экзамен						36		50
Итого:		18	36		18	54		200

Критерии оценки качества освоения студентами дисциплины:

- «удовлетворительно» – от 100 до 138 баллов;
- «хорошо» – от 139 до 180 баллов;
- «отлично» – от 181 до 200 баллов.

Приложение В

(обязательное)

Карта учебно-методического обеспечения

дисциплины «**Квантовая химия**»

Направление (специальность) 020201.65– Фундаментальная и прикладная химия

Формы обучения очная

Курс 4 Семестр 8

Часов: всего 144, лекций 18, практ. зан. 36, лаб. раб. з, СРС 54

Обеспечивающая кафедра ФТТМ

Таблица В.1 - Обеспечение учебного модуля учебными изданиями

Библиографическое описание издания (автор, наименование, вид, место и год издания, кол. стр.)	Кол. экз. в библ. Нов- ГУ	Наличие в ЭБС
Учебники и учебные пособия		
1. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие : для вузов / В. Г. Цирельсон. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 495 с.	13	
2. Ермаков А. И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособие : для вузов / А. И. Ермаков. – М. : Юрайт, 2010. – 555 с.	5	
3. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики : Учеб.пособие. – 7-е изд.,стер. / Д.И. Блохинцев. – СПб.;М.;Краснодар : Лань, 2004. – 664 с.	12	
4. Иродов И.Е. Квантовая физика. Основные законы. – 3-е изд.,стер. / И.Е. Иродов. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. – 256 с.	2	
5. Карлов Н.В. Начальные главы квантовой механики. /Н.В. Карлов. – М. : Физматлит, 2004. – 359 с.	2	
Учебно-методические издания		
6 Рабочая программа модуля с приложениями «Квантовая химия» /Авт.-сост. М.А.Захаров; НовГУ им. Ярослава Мудрого. – В.Новгород, 2014. – 21 с.		
7 Филиппов Д.А. Основы квантовой механики: учеб. пособие / НовГУ им. Ярослава Мудрого. – Великий Новгород, 2007. – 145 с.	11	
8 Филиппов Д.А. Задачи по квантовой механике/ Д.А.Филиппов, М.А.Захаров/ НовГУ им. Ярослава Мудрого. – Великий Новгород, 2010. – 43 с.	10	
9 Захаров М.А. Динамика кристаллической решетки: гармоническое приближение и ангармонизмы: учеб.-метод. пособие / НовГУ. – В.Новгород, 2007. – 48 с.	10	

Действительно для учебного года _____/_____

Зав. кафедрой _____ Б.И. Селезнев

_____ 20 ____ г.

СОГЛАСОВАНО

НБ НовГУ:

должность

подпись

расшифровка