

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

Институт электронных и информационных систем
Кафедра физики твердого тела и микроэлектроники



УТВЕРЖДАЮ
Директор ИЭИС, профессор
С.И.Эминов
30.06.2017 г.

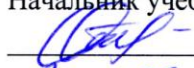
КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Учебный модуль по специальности
04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия

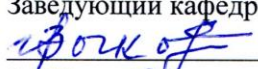
Рабочая программа

СОГЛАСОВАНО

Начальник учебного отдела

 О.Б.Широколобова
« 30 » 06 2017 г.

Заведующий кафедрой ФПХ

 И.В.Зыкова
« 09 » 06 2017 г.

Разработал

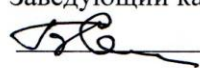
Профессор КФТТМ

 М.А.Захаров
« 05 » 06 2017 г.

Принято на заседании КФТТМ

Протокол № 4 от 05.06 2017 г.

Заведующий кафедрой

 Б.И.Селезнев

1 Цели освоения учебного модуля

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

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

Основные задачи УМ:

- 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 и квантовой химии как при изучении смежных учебных модулей подготовки специалиста, так и в своей дальнейшей профессиональной деятельности.

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

2 Место учебного модуля в структуре ОП 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия

Учебный модуль «Квантовая химия» относится к базовой части цикла общепрофессиональных дисциплин Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования по специальности 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия.

Изучение курса базируется на знаниях, полученных при изучении курсов «Физика», «Математика», «Физическая химия» и изучается в восьмом семестре.

В результате освоения предшествующих модулей и для изучения УМ «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 УМ «Квантовая химия», как предшествующего, обеспечивают изучение последующих курсов, входящих в базовую и вариативную части цикла общепрофессиональных дисциплин по специальности 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия.

3 Требования к результатам освоения учебного модуля

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

- ОПК-1 – способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач;
- ДПК-16 – способность использовать основные законы естественнонаучных дисциплин, методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования для ориентации в создающихся условиях производственной деятельности и адаптации к нестандартным ситуациям.

В результате освоения учебного модуля «Квантовая химия» студент должен знать, уметь и владеть:

Код компетенции	Уровень освоения компетенции	Знать	Уметь	Владеть
ОПК-1	повышенный	Основные понятия, законы и наиболее важные элементы математического аппарата квантовой механики и квантовой химии.	Исследовать свойства микроскопических систем методами квантовой механики и квантовой химии.	Основными математическими методами нерелятивистской квантовой механики и квантовой химии.
ДПК-16	повышенный	Основы квантовомеханического подхода при решении научно-исследовательских и практических задач.	Находить правильные и оптимальные способы описания и моделирования конкретных микроскопических систем в рамках квантовомеханического подхода при решении научно-исследовательских и практических задач.	Методикой физически интерпретировать и анализировать результаты расчетов квантовомеханических характеристик микроскопических систем при решении научно-исследовательских и практических задач.

4 Структура и содержание учебного модуля

4.1 Трудоемкость учебного модуля

Учебная работа (УР)	Распределение по семестрам	Коды формируемых компетенций
	8 сем.	
Трудоемкость учебного модуля в зачетных единицах (ЗЕ)	4	
Распределение трудоемкости по видам УР в академических часах (АЧ):	144	
- лекции	18	ОПК-1, ДПК-16
- практические занятия	36	
- аудиторная СРС	18	
- внеаудиторная СРС	54	
Аттестация:		
- экзамен	36	

4.2 Содержание и структура разделов учебного модуля

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 учебного модуля с указанием трудоемкости по видам учебной работы представлены в технологической карте (приложение Б).

4.3 Организация изучения учебного модуля

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

5 Контроль и оценка качества освоения учебного модуля

Контроль качества освоения студентами УМ и его 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 УМ 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 модулю – 200. Пороговому уровню соответствует 100 баллов.

Оценка качества освоения учебного модуля осуществляется с использованием фонда оценочных средств, разработанного для данного модуля, по всем формам контроля в соответствии с Положением «Об организации учебного процесса по основным образовательным программам высшего профессионального образования» и Положением «О фонде оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации студентов и итоговой аттестации выпускников».

В качестве оценочных средств на протяжении семестра используются: разноуровневые задачи, опросы, контрольная работа и экзамен. Содержание видов контроля и график отражены в технологической карте учебного модуля приложения Б. Паспорта компетенций представлены в приложении В.

6 Учебно-методическое и информационное обеспечение

Учебно-методическое и информационное обеспечение учебного модуля представлено Картой учебно-методического обеспечения (приложение Г).

7 Материально-техническое обеспечение учебного модуля

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

Приложения (обязательные):

А – Методические рекомендации по организации изучения УМ

Б – Технологическая карта

В – Паспорта компетенций

Г – Карта учебно-методического обеспечения УМ

Приложение А (обязательное)

Методические рекомендации по организации изучения учебного модуля «Квантовая химия»

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

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

А.1 Методические рекомендации по теоретической части учебного модуля

Теоретическая часть модуля 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) данного учебного модуля.

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 УМ.

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 УМ.

Вопросы к экзамену по учебному модулю «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
ФГБОУ ВО Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого
Институт электронных и информационных систем
Кафедра физики твердого тела и микроэлектроники

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ

по учебному модулю

«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 учебного модуля «Квантовая химия»

Раздел УМ	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

Раздел УМ	Технология и форма проведения занятий	Задания на СРС	Дополнительная литература и интернет-ресурсы
6. Приближенные методы квантовой химии.	– 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.: ВНУ, 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
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.: ВНУ, 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.: ВНУ, 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

Приложение Б
(обязательное)

Технологическая карта учебного модуля «Квантовая химия»
семестр – 8, ЗЕ – 4, вид аттестации – экзамен, акад.часов – 144, баллов рейтинга – 200

Номер и наименование раздела учебного модуля, КП/КР	№ не- дели сем.	Трудоемкость, ак.час					Форма текущего контроля успеваемости (в соответствии с паспортом ФОС)	Максим. кол- во баллов рейтинга
		Аудиторные занятия				СРС		
		ЛЕК	ПЗ	ЛР	АСРС			
1 Волновая функция, ее основные свойства и принцип суперпозиции состояний.	1	2	4		2	6	опрос	5
2. Операторы физических величин.	3	2	4		2	6	разноуровневые задачи	10
							опрос	5
3. Принцип неопределенности Гайзенберга	5	1	2		1	3	опрос	5
4. Волновое и стационарное уравнения Шредингера.	6	4	8		4	12	разноуровневые задачи	40
							опрос	5
5. Движение частиц в сферически симметричных полях.	11	2	4		2	6	разноуровневые задачи	20
							опрос	5
6. Приближенные методы квантовой химии.	12	2	4		2	6	разноуровневые задачи	20
							опрос	5
7. Ансамбли квантовых частиц и методы их описания.	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 учебного модуля:

- «удовлетворительно» – от 100 до 139 баллов;
- «хорошо» – от 140 до 179 баллов;
- «отлично» – от 180 до 200 баллов.

Приложение В
(обязательное)

Паспорта компетенций

ОПК-1 – способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач.

Уровни	Показатели	Оценочная шкала		
		удовлетворительно	хорошо	отлично
Повышенный уровень	Знает основные понятия, законы и наиболее важные элементы математического аппарата квантовой механики и квантовой химии.	Испытывает трудности в формулировке основных понятий, законов и наиболее важных элементов математического аппарата квантовой механики и квантовой химии.	Недостаточно четко формулирует основные понятия, законы и наиболее важные элементы математического аппарата квантовой механики и квантовой химии.	Четко формулирует основные понятия, законы и наиболее важные элементы математического аппарата квантовой механики и квантовой химии.
	Умеет исследовать свойства микроскопических систем методами квантовой механики и квантовой химии.	Испытывает трудности в исследовании свойства микроскопических систем методами квантовой механики и квантовой химии.	Не всегда корректно умеет исследовать свойства микроскопических систем методами квантовой механики и квантовой химии.	Способен в полной мере исследовать свойства микроскопических систем методами квантовой механики и квантовой химии.
	Владеет основными математическими методами нерелятивистской квантовой механики и квантовой химии.	Испытывает трудности при использовании методов нерелятивистской квантовой механики и квантовой химии.	Недостаточно уверенно использует методы нерелятивистской квантовой механики и квантовой химии.	Полностью владеет основными математическими методами нерелятивистской квантовой механики и квантовой химии.

ДПК-16 – способность использовать основные законы естественнонаучных дисциплин, методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования для ориентации в создающихся условиях производственной деятельности и адаптации к нестандартным ситуациям

Уровни	Показатели	Оценочная шкала		
		удовлетворительно	хорошо	отлично
Повышенный уровень	Знает основы квантовомеханического подхода при решении научно-исследовательских и практических задач.	Испытывает трудности при демонстрации знаний основ квантовомеханического подхода при решении научно-исследовательских и практических задач.	Допускает неточности при демонстрации знаний основ квантовомеханического подхода при решении научно-исследовательских и практических задач.	Имеет целостное представление об основах квантовомеханического подхода при решении научно-исследовательских и практических задач.
	Умеет находить правильные и оптимальные способы описания и моделирования конкретных микроскопических систем в рамках квантовомеханического подхода при решении научно-исследовательских и практических задач.	Испытывает трудности в умении находить правильные и оптимальные способы описания и моделирования конкретных микроскопических систем в рамках квантовомеханического подхода при решении научно-исследовательских и практических задач.	Недостаточно уверенно умеет находить правильные и оптимальные способы описания и моделирования конкретных микроскопических систем в рамках квантовомеханического подхода при решении научно-исследовательских и практических задач.	Способен в полной мере находить правильные и оптимальные способы описания и моделирования конкретных микроскопических систем в рамках квантовомеханического подхода при решении научно-исследовательских и практических задач.
	Владеет методикой физически интерпретировать и анализировать результаты расчетов квантовомеханических характеристик микроскопических систем при решении научно-исследовательских и практических задач..	Испытывает трудности во владении методикой физически интерпретировать и анализировать результаты расчетов квантовомеханических характеристик микроскопических систем при решении научно-исследовательских и практических задач.	Недостаточно уверенно владеет методикой физически интерпретировать и анализировать результаты расчетов квантовомеханических характеристик микроскопических систем при решении научно-исследовательских и практических задач.	В полной мере владеет методикой физически интерпретировать и анализировать результаты расчетов квантовомеханических характеристик микроскопических систем при решении научно-исследовательских и практических задач.

Приложение Г
(обязательное)
Карта учебно-методического обеспечения

УМ «**Квантовая химия**»

Направление (специальность) 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия

Формы обучения очная

Курс 4 Семестр 8

Всего: ЗЕ 4, лекций 18, практ. зан. 36, лаб. раб. 3, СРС 54

Обеспечивающая кафедра ФТТМ

Таблица Г.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.	10	
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, 2017. – 18 с.		
7 Филиппов Д.А. Основы квантовой механики: учеб. пособие / Новгород. гос. ун-т им. Ярослава Мудрого. – Великий Новгород, 2007. – 145 с.	11	
8 Филиппов Д.А. Задачи по квантовой механике/ Д.А.Филиппов, М.А.Захаров/ Новгород. гос. ун-т им. Ярослава Мудрого. – Великий Новгород, 2010. – 43 с. – Режим доступа: https://novsu.bibliotech.ru/Reader/Book/-551 https://novsu.bibliotech.ru/Reader/Book/-365	11	
Захаров М. А. Динамика кристаллической решетки: гармоническое приближение и ангармонизмы : учеб.-метод. пособие / М. А. Захаров ; Новгород. гос. ун-т им. Ярослава Мудрого. - Великий Новгород, 2007. - 48с.	10	

Таблица Г.2 – Информационное обеспечение учебного модуля

Название программного продукта, Интернет-ресурса	Электрон- ный адрес	Примеча- ние

Таблица Г.3 – Дополнительная литература

Библиографическое описание издания (автор, наименование, вид, место и год издания, кол. стр.)	Кол. экз. в библ. НовГУ	Наличие в ЭБС
1. А.С. Давыдов: Квантовая механика: учебное пособие для вузов. – 3-е изд., стер. –М.: ВНУ, 2011. tp://www.ph4s.ru/book_ph_kv_mex_zad.html	нет	
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. tp://www.ph4s.ru/book_ph_kv_mex_zad.html	нет	

Действительно для учебного года _____ / _____

Зав. кафедрой _____ Б.И. Селезнев

_____ 20 ____ г.

СОГЛАСОВАНО

НБ НовГУ:

должность

подпись

расшифровка