

Министерство науки и высшего образования 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

В.А. Шульцев

«05» 06 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

учебной дисциплины

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

по направлению подготовки

18.03.01 Химическая технология

Направленность (профиль) Технология неорганических веществ

СОГЛАСОВАНО

Начальник отдела обеспечения
деятельности ИЭИС

И.Н. Гуркова
«05» 06 2023 г.

И.о. заведующего кафедрой ФПХ

В.А. Исаков
«05» 06 2023 г.

Разработал

Профессор КФТТМ

М.А.Захаров
«26» 04 2023 г.

Принято на заседании КФТТМ

Протокол № 14 от 02.06 2023 г.

И.о. заведующего кафедрой КФТТМ

И.С. Телина
«02» 06 2023 г.

1 Цели и задачи освоения учебной дисциплины

Цель освоения учебной дисциплины «Основы квантовой химии»: формирование компетентности студентов в области квантовой механики и квантовой химии, способствующей становлению их готовности к решению задач профессиональной деятельности.

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 квантово-механических задач;
- подготовить студентов к активному использованию приобретенных знаний и умений в области квантовой механики и квантовой химии как при изучении смежных учебных модулей подготовки бакалавра, так и в своей дальнейшей профессиональной деятельности.

2 Место учебной дисциплины в структуре ОПОП

Учебная дисциплина относится к обязательной части учебного плана основной профессиональной образовательной программы бакалавриата по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология и направленности (профилю) Технология неорганических веществ (далее – ОПОП).

В качестве входных требований выступают сформированные ранее компетенции обучающихся, приобретенные ими в рамках изучения следующих дисциплин: «Математика», «Физика», «Физическая химия».

Освоение учебной дисциплины является компетентностным ресурсом для дальнейшего изучения учебных дисциплин направления подготовки 18.03.01: «Физико-химические методы исследования наноструктур», «Нанохимия и нанотехнология».

3 Требования к результатам освоения учебной дисциплины

Перечень компетенций, которые формируются в процессе освоения учебной дисциплины:

Общепрофессиональные компетенции:

ОПК-1 Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов;

ОПК-2 Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности.

Таблица 1 – Результаты освоения учебной дисциплины

<i>Код и наименование компетенции</i>	<i>Результаты освоения учебной дисциплины (индикаторы достижения компетенций)</i>		
ОПК-1 Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов	ОПК-1.1 Знать методы интерпретации результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	ОПК-1.2 Уметь формулировать заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	ОПК-1 Владеть методами систематизации и анализа результатов химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результатов расчетов свойств веществ и материалов
ОПК-2 Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-2.1 Знать теоретические основы фундаментальных разделов математики и физики при планировании работ химической направленности	ОПК-2.2 Уметь интерпретировать результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	ОПК-2.3 Владеть методами обработки данных с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик

4 Структура и содержание учебной дисциплины

4.1 Трудоемкость учебной дисциплины

Таблица 2 – Трудоемкость учебной дисциплины для очной формы обучения

<i>Части учебной дисциплины (модуля)</i>	<i>Всего</i>	<i>Распределение по семестрам</i>
		<i>6 семестр</i>
1. Трудоемкость учебной дисциплины (модуля) в зачетных единицах (ЗЕТ)	4	4
2. Контактная аудиторная работа в академических часах (АЧ)	78	78
3. Курсовая работа/курсовой проект (АЧ) (при наличии)	-	-
4. Внеаудиторная СРС в академических часах (АЧ)	66	66
5. Промежуточная аттестация (зачет; дифференцированный зачет; экзамен)	Экзамен	Экзамен

Таблица 3 – Трудоемкость учебной дисциплины для заочной формы обучения

Части учебной дисциплины (модуля)	Всего	Распределение по семестрам	
		5 семестр	6 семестр
1. Трудоемкость учебной дисциплины (модуля) в зачетных единицах (ЗЕТ)	4		4
2. Контактная аудиторная работа в академических часах (АЧ)	52	1	51
3. Курсовая работа/курсовой проект (АЧ) (при наличии)	-		-
4. Внеаудиторная СРС в академических часах (АЧ)	92		92
5. Промежуточная аттестация (зачет; дифференцированный зачет; экзамен)	Экзамен		Экзамен

4.2 Содержание учебной дисциплины

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

Раздел 2. Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновое и стационарное уравнения Шредингера.

Раздел 3. Движение частиц в сферически симметричных полях. Приближенные методы квантовой химии.

Раздел 4. Ансамбли квантовых частиц и методы их описания. Приближенные методы Хартри-Фока и Томаса-Ферми.

4.3 Трудоемкость разделов учебной дисциплины и контактной работы

Таблица 4 – Трудоемкость разделов учебной дисциплины для очной и заочной форм обучения

№	Наименование разделов (тем) учебной дисциплины (модуля), УЭМ, наличие КП/КР	Контактная работа (в АЧ)					Внеауд. СРС (в АЧ)	Формы текущего контроля
		Аудиторная			В т.ч. СРС	Экзамен		
		ЛЕК	ПЗ	ЛР				
1.	Волновая функция, ее основные свойства и принцип суперпозиции состояний. Операторы физических величин	4/1	7/3		2/-		16/23	разноуровневые задачи, опрос
2.	Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновое и стационарное уравнения Шредингера	4/1	7/3		2/-		16/23	разноуровневые задачи, опрос
3.	Движение частиц в сферически симметричных полях. Приближенные методы квантовой химии	3/1	7/3		2/-		17/23	разноуровневые задачи, опрос
4.	Ансамбли квантовых частиц и методы их описания. Приближенные методы Хартри-Фока и Томаса-Ферми	3/1	7/3		2/-		17/23	разноуровневые задачи, опрос
	Промежуточная аттестация					36		экзамен
	ИТОГО	14/4	28/12	-	8/-	36	66/92	

4.4 Лабораторные работы и курсовые работы/курсовые проекты

4.4.1 Перечень тем лабораторных работ:

Лабораторные работы не предусмотрены учебным планом.

4.4.2 Примерные темы курсовых работ/курсовых проектов:

Курсовые работы/курсовые проекты не предусмотрены учебным планом.

5 Методические рекомендации по организации освоения учебной дисциплины

Таблица 5 – Методические рекомендации по организации лекций для очной и заочной форм обучения

№	Темы лекционных занятий (форма проведения)	Трудоем- кость в АЧ
	Раздел 1. Волновая функция, ее основные свойства и принцип суперпозиции состояний. Операторы физических величин	
1.	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. 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. 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	4/1

№	Темы лекционных занятий (форма проведения)	Трудоем- кость в АЧ
	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. 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 (информационная лекция)	
	Раздел 2. Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновое и стационарное уравнения Шредингера	
2.	Лекция № 2 Условия, при которых несколько физических величин могут иметь определенные значения в одном состоянии. Прямая и обратная теоремы. Примеры. Соотношение неопределенностей для физических величин и его отрицательное содержание. Различные формы соотношения Гейзенберга, канонически сопряженные величины в классической механике и дополнительные величины в квантовой механике. Принцип дополнительности Бора. 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. 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. Прохождение частицы через потенциальный барьер. Движение частицы над потенциальным барьером и потенциальной ямой. Коэффициенты прохождения и отражения. Примеры. Гармонический осциллятор. Метод вторичного квантования. Операторы рождения и уничтожения, оператор числа частиц и перестановочные соотношения для них. Уровни энергии гармонического осциллятора. Трехмерный гармонический осциллятор (информационная лекция)	4/1

№	Темы лекционных занятий (форма проведения)	Трудоем- кость в АЧ
	Раздел 3. Движение частиц в сферически симметричных полях. Приближенные методы квантовой химии	
3.	Лекция № 3 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 яме. Движение в кулоновском поле. Случай дискретного спектра. Случай непрерывного спектра. Радиальные волновые функции водорода. Атомные орбитали водородоподобного атома. 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. Вариационные методы нахождения собственных чисел и собственных функций операторов. Пробные функции. Вариационные параметры. Прямой и обратный вариационные методы (информационная лекция)	3/1
	Раздел 4. Ансамбли квантовых частиц и методы их описания. Приближенные методы Хартри-Фока и Томаса-Ферми	
4.	Лекция № 4 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 Слэтера. Схемы Юнга. 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. Метод Хартри. Самосогласованное поле Хартри. Метод Хартри-Фока. Примеры расчетов. Статистический метод Томаса-Ферми. Уравнение Томаса-Ферми в безразмерных переменных. Применение метода Томаса-Ферми к нейтральным атомам и ионам. 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 (информационная лекция)	3/1
	ИТОГО	14/4

Таблица 6 – Методические рекомендации по организации практических занятий для очной и заочной форм обучения

№	Темы практических занятий (форма проведения)	Трудоем- кость в АЧ
1.	Волновая функция, ее основные свойства и принцип суперпозиции состояний. Операторы физических величин (решение задач с обсуждением результатов)	7/3
2.	Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновое и стационарное уравнения Шредингера (решение задач с обсуждением результатов)	7/3
3.	Движение частиц в сферически симметричных полях. Приближенные методы квантовой химии (решение задач с обсуждением результатов)	7/3
4.	Ансамбли квантовых частиц и методы их описания. Приближенные методы Хартри-Фока и Томаса-Ферми (решение задач с обсуждением результатов)	7/3
	ИТОГО	28/12

Методические рекомендации по теоретической части учебной дисциплины

Теоретическая часть учебной 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.

Как правило, в начале лекции проводится опрос (не более 5 мин.) для экспресс-оценки уровня усвоения теоретического материала студентами. Опрос состоит из вопросов, пример которых приведен в Фонде оценочных средств данной учебной дисциплины.

Методические рекомендации по практическим занятиям

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

6 Фонд оценочных средств учебной дисциплины

Фонд оценочных средств представлен в приложении А.

7 Условия освоения учебной дисциплины

7.1 Учебно-методическое обеспечение

Учебно-методического обеспечение учебной дисциплины (модуля) представлено в приложении Б.

7.2 Материально-техническое обеспечение

Таблица 7 – Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины

№	Требование к материально-техническому обеспечению согласно ФГОС ВО	Наличие материально-технического оборудования
1.	Учебные аудитории для проведения учебных занятий	аудитория для проведения лекционных и/или практических занятий: учебная мебель (столы, стулья, доска)
		компьютерный класс с выходом в Интернет, в том числе для проведения практических занятий
		помещения для самостоятельной работы (наличие компьютера, выход в Интернет)
2.	Мультимедийное оборудование	ПК IBM ATX Inwia S500 с подключением к сети «Интернет», монитор 17/КК/м, проектор Epson EMP-X5, экран подвесной (800x600)

3. Программное обеспечение		
Наименование программного продукта	Обоснование для использования (лицензия, договор, счёт, акт или иное)	Дата выдачи
Microsoft Windows 7 Professional	Dreamspark (Imagine) № 370aef61-476a-4b9f-bd7c-84bb13374212	30.04.2015
Microsoft Windows 10 for Educational Use	Dreamspark (Imagine) № 370aef61-476a-4b9f-bd7c-84bb13374212	30.04.2015
Microsoft Office 2013 Standard	Open License № 62018256	31.07.2016
Антиплагиат. Вуз.*	Договор №3341/12/ЕП(У)21-ВБ	29.01.2021
«Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный Russian Education Renewal. 250-499 Node I year License» /1 год *	Договор №158/ЕП(У)22-ВБ	21.09.2022
ContentReader PDF 15 Business Версия для скачивания (годовая лицензия с академической скидкой) *	Договор №282/Ю	27.10.2022
MS Office 365	Безвозмездно передаваемое ВУЗам	-
Adobe Acrobat	свободно распространяемое	-
Teams	свободно распространяемое	-
Skype	свободно распространяемое	-
Zoom	свободно распространяемое	-

* отечественное производство

Приложение А
(обязательное)
Фонд оценочных средств
учебной дисциплины «Основы квантовой химии»

1 Структура фонда оценочных средств

Фонд оценочных средств состоит из двух частей:

а) открытая часть - общая информация об оценочных средствах (название оценочных средств, проверяемые компетенции, баллы, количество вариантов заданий, методические рекомендации для применения оценочных средств и пр.), которая представлена в данном документе, а также те вопросы и задания, которые могут быть доступны для обучающегося;

б) закрытая часть - фонд вопросов и заданий, которая не может быть заранее доступна для обучающихся (опросы, разноуровневые задачи и пр.) и которая хранится на кафедре.

2 Перечень оценочных средств текущего контроля и форм промежуточной аттестации

Таблица А.1 – Перечень оценочных средств

№	Оценочные средства для текущего контроля	Разделы (темы) учебной дисциплины	Баллы	Проверяемые компетенции
1.	Контрольные опросы	Разделы 1-4	10х4	ОПК-1 ОПК-2
2.	Решение задач	Разделы 1-3	30х3	
3.	Решение задач	Раздел 4	20х1	
<i>Промежуточная аттестация</i>				
	Экзамен		50	ОПК-1, ОПК-2
	ИТОГО		200	

3 Рекомендации к использованию оценочных средств

1) Контрольный опрос

<i>Критерии оценки</i>	<i>Количество вариантов заданий</i>	<i>Количество вопросов</i>
Способен дать правильные ответы на вопросы	1	по каждому разделу свое кол-во вопросов

Пример вопросов по разделу 1:

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.

2) Решение задач

<i>Критерии оценки</i>	<i>Количество вариантов заданий</i>	<i>Количество задач</i>
Способен правильно подобрать нужные формулы и правильно их применить	5	по каждому разделу свое кол-во задач
Выполнены нужные вычисления и преобразования		
Получен правильный ответ		

Пример задачи по разделу 2:

ЗАДАЧА № 1

В состоянии, описываемом волновой функцией вида

$$\Psi(x) = C \exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right),$$

где p_0 , x_0 , a – вещественные параметры, найти функцию распределения по координатам частиц. Определить средние значения и флуктуации координаты и импульса частицы.

3) Экзамен

<i>Критерии оценки</i>	<i>Количество вариантов заданий</i>	<i>Количество вопросов</i>
Демонстрирует всестороннее и глубокое знание теоретического материала	15	3
Задача решена правильно		

Экзамен состоит из двух частей: теоретической и практической. Теоретическая часть экзамена представляет собой два вопроса. Практическая часть экзамена состоит из задачи. Комплект экзаменационных билетов представлен в закрытой части ФОС (хранится на кафедре).

Вопросы к экзамену

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 для очной и заочной форм обучения

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого
Институт электронных и информационных систем
Кафедра физики твердого тела и микроэлектроники

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 0

Учебная дисциплина «**Основы квантовой химии**»
Для направления подготовки 18.03.01 Химическая технология
Направленность (профиль) Технология неорганических веществ

1. Понятие волновой функции. Волновая функция свободно движущейся частицы и ее свойства.

2. Метод ВКБ. Точки поворота.

3. Задача.

Найдите уровни энергии и собственные функции частицы массы m в бесконечной цилиндрической потенциальной яме радиуса a . Потенциальная энергия ямы в цилиндрических координатах:

$$U = \begin{cases} 0 & \rho \leq a; \\ \infty & \rho > a. \end{cases}$$

Принято на заседании кафедры

«___»_____ 20__ г.

Протокол № _____

Заведующий кафедрой ФТТМ _____ (ФИО)

Все материалы для проведения промежуточного контроля хранятся на кафедре.

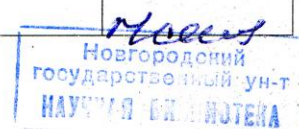
Приложение Б
(обязательное)
Карта учебно-методического обеспечения
учебной дисциплины «Основы квантовой химии»

Таблица Б.1 – Основная литература

Библиографическое описание издания (автор, наименование, вид, место и год издания, кол. стр.)	Кол. экз. в библ. НовГУ	Наличие в ЭБС
Печатные источники		
1 Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики : учебное пособие / Д. И. Блохинцев. - 7-е изд., стер. - Санкт-Петербург ; Москва ; Краснодар : Лань, 2004. - 664 с. - ISBN 5-8114-0554-5	12	
2 Борисёнок С. В. Квантовая статистическая механика / С. В. Борисёнок, А. С. Кондратьев. - Москва : Физматлит, 2011. - 132, [1] с. : ил. - Библиогр.: с. 131-132. - Прил.: с. 126-130. - ISBN 978-5-9221-1277-2	2	
3 Иродов И. Е. Квантовая физика. Основные законы. - Москва : Физматлит : Лаборатория Базовых Знаний ; Санкт-Петербург : Невский Диалект, 2001. - 271с. : ил. - (Общая физика). - Прил.: с. 251-261. - Указ.: с. 262-271. - ISBN 5-93208-055-8	1	
Иродов И.Е. Квантовая физика. Основные законы. - 3-е изд., стер. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. - 256с. : ил. - (Общая физика). - Прил.: с. 245-251. - Указ.: с. 252-256. - ISBN 978-5-94774-618-1	2	
4 Карлов Н.В. Начальные главы квантовой механики. - Москва : Физматлит, 2004. - 359с. - ISBN 5-9221-0538-8	2	
5 Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 495, [1] с., [12] л. ил. : ил. - (Учебник для высшей школы). - Библиогр.: с. 485-487, в конце гл. - Прил.: с. 476-484. - ISBN 978-5-9963-0080-8	13	
Электронные ресурсы		

Таблица Б.2 – Дополнительная литература

Библиографическое описание издания (автор, наименование, вид, место и год издания, кол. стр.)	Кол. экз. в библ. НовГУ	Наличие в ЭБС
Печатные источники		
1 Ермаков А. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие для вузов / А. И. Ермаков. - Москва : Юрайт, 2010. - 555, [1] с. - (Основы наук). - Библиогр.: с. 508-516. - Прил.: с. 517-527. - Указ.: с. 540-555. - ISBN 978-5-9916-0587-8. - ISBN 978-5-9692-0331-0	5	
2 Захаров М. А. Динамика кристаллической решетки: гармоническое приближение и ангармонизмы : учебно-методическое пособие / М. А. Захаров ; Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого. - Великий Новгород, 2007. - 48 с. – Текст: электронный. // ЭБС НовГУ. - URL: https://novsu.bookonlime.ru/reader/book/366 ; https://novsu.bookonlime.ru/reader/book/389	2	ЭБС НовГУ
3 Филиппов Д. А. Основы квантовой механики : учебное пособие / Д. А. Филиппов ; Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого. - Великий Новгород, 2007. - 145, [1] с. – Текст: электронный. // ЭБС НовГУ. - URL: https://novsu.bookonlime.ru/reader/book/569	2	ЭБС НовГУ



Библиографическое описание издания (автор, наименование, вид, место и год издания, кол. стр.)	Кол. экз. в библ. НовГУ	Наличие в ЭБС
4 Филиппов Д. А. Задачи по квантовой механике / Д. А. Филиппов, М. А. Захаров ; Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого. - Великий Новгород, 2010. - 42, [1] с. – Текст: электронный. // ЭБС НовГУ. - URL: https://novsu.bookonline.ru/reader/book/551 ; https://novsu.bookonline.ru/reader/book/365	2	ЭБС НовГУ
Электронные ресурсы		

Таблица Б.3 – Информационное обеспечение

Наименование ресурса	Договор	Срок договора
Профессиональные базы данных		
База данных электронной библиотечной системы вуза «Электронный читальный зал-БиблиоТех» https://www.novsu.ru/dept/1114/bibliotech/	Договор № БТ-46/11 от 17.12.2014	бессрочный
Электронный каталог научной библиотеки http://mars.novsu.ac.ru/MarcWeb/	База собственной генерации	бессрочный
База данных «Аналитика» (картотека статей) http://mars.novsu.ac.ru/MarcWeb/	База собственной генерации	бессрочный
База данных Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU https://elibrary.ru/	в открытом доступе	-
Национальная подписка в рамках проекта Министерства образования и науки РФ (Госзадание № 4/2017 г.) к наукометрическим БД Scopus и Web of Science https://www.webofscience.com/wos/woscc/basic-search https://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic#basic	регистрация (территория вуза)	2022
База данных электронно-библиотечной системы «Национальная электронная библиотека» https://нэб.рф	в открытом доступе	-
Информационные справочные системы		
Университетская информационная система «РОССИЯ» https://uisrussia.msu.ru	в открытом доступе	-
Национальный портал онлайн обучения «Открытое образование» https://openedu.ru	в открытом доступе	-
Официальный сайт Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии http://protect.gost.ru/	в открытом доступе	-

Проверено НБ НовГУ



Зав. кафедрой

[Подпись]
подпись
« 02 » 06

И. О. Галина
И. О. Фамилия
2023 г.

Рабочая программа актуализирована на 20__/20__ учебный год.
Протокол № ____ заседания кафедры от « ____ » _____ 20__ г.
Разработчик: _____
Зав. кафедрой _____

Рабочая программа актуализирована на 20__/20__ учебный год.
Протокол № ____ заседания кафедры от « ____ » _____ 20__ г.
Разработчик: _____
Зав. кафедрой _____

Рабочая программа актуализирована на 20__ / 20__ учебный год.
Протокол № ____ заседания кафедры от « ____ » _____ 20__ г.
Разработчик: _____
Зав. кафедрой _____

[illegible]