

Ульяновский государственный университет  
Экологический факультет

Профессиональный электив: Квантовая механика и квантовая химия

Методические указания  
для самостоятельной работы бакалавров  
направления подготовки 04.03.01 Химия

Ульяновск, 2022

**Рекомендовано к введению в образовательный процесс решением  
Ученого совета Института медицины, экологии и физической культуры**

Рецензент – к.х.н., доцент кафедры химии УлГПУ Кафиятуллина А.Г..

Квантовая механика и квантовая химия: Методические указания самостоятельной работы бакалавров направления подготовки 04.03.01 Химия/ Д.А. Богданова. – Ульяновск: УлГУ, 2022. – 9 с.

Методическое пособие по дисциплине «Профессиональный электив. Квантовая механика и квантовая химия» предназначено в помощь студентам, обучающимся по направлению подготовки 04.03.01 Химия, для самостоятельного изучения отдельных разделов курса. Методические указания включают в себя требования к результатам освоения дисциплины, тематический план дисциплины, список рекомендуемой литературы, контрольные вопросы к зачету.

© Ульяновский государственный университет,  
2022

## СОДЕРЖАНИЕ

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ
2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП
3. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ
4. СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ
5. РАЗДЕЛЫ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЯ
6. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ДИСЦИПЛИНЫ
7. ВОПРОСЫ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ ПОДГОТОВКИ ПО ТЕМАМ КУРСА
8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель освоения дисциплины:

является изучение начал квантовой механики и ее основных приложений к химическим системам. Подробный анализ решений простейших квантово-механических задач и рассмотрение модельных систем в теории химической связи позволяют наполнить строгим физическим содержанием основные понятия, которыми химик пользуется в своей повседневной практике при характеристике свойств многоэлектронных атомов и молекулярных систем, а также определить границы применимости те или иных теоретических закономерностей, научить прогнозировать свойства химических элементов и их соединений. Кроме того, этот курс является базой для изучения всех физико-химических методов исследования структуры молекулярных систем (ЭПР, ЯМР, спектры КР, УФ, ИК и др.) и их реакционной способности

Задачи освоения дисциплины:

изучение основных постулатов квантовой механики;  
изучение приближенных методов решения квантово-механических задач;  
изучение электронного строения молекул;  
решение прикладных задач квантовой химии

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП:

Дисциплина относится к обязательным дисциплинам вариативной части учебного плана, базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении предшествующих курсов (неорганическая химия, аналитическая химия и др.), углубляет фундаментальную естественнонаучную подготовку студентов по направлению подготовки бакалавров 04.03.01 Химия.

Данная дисциплина изучается на 3 курсе, в 5 семестре

## 3. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ, СООТНЕСЕННЫХ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Изучение дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» в рамках освоения ОПОП 04.03.01 - Химия направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций:

Код и наименование реализуемой компетенции	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с индикаторами достижения компетенций
--	--

<p>ПК-1: способность выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам</p>	<p>Знать: устройство физико-химических лабораторий; методы пробоподготовки веществ и их последующий анализ</p> <p>Уметь: подбирать наиболее оптимальные методики анализа веществ по различным показателям</p> <p>Владеть: навыками химических, физико-химических методов анализа веществ</p>
<p>ПК-3 Владеет системой фундаментальных химических понятий</p>	<p>Знать: физические основы необходимые для решения профессиональных задач в области квантовой механики понятийный аппарат квантовой механики и его связь с системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии</p> <p>Уметь: использовать математический аппарат в решении типовых профессиональных задач по основным разделам квантовой механики решать модельные задачи механики квантовой частицы и анализировать их решения в терминах атомно-молекулярной структуры веществ</p> <p>Владеть: Навыками решения профессиональных задач квантовой механики формами и методами научного познания при формулировании и решении профессиональных задач в области квантовой механики</p>
<p>ПК-4 Способен применять основные естественно-научные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов</p>	<p>Знать: роль квантовых расчетов</p> <p>Уметь: Уметь выбирать метод расчета для конкретной химической задачи, владеть методологией групп симметрии</p> <p>Владеть: Владеть методологией групп симметрии</p>

#### 4. СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

### **Основная :**

1. Цирельсон, Владимир Григорьевич. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] : учеб. пособие / В. Г. Цирельсон. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с.

### **Дополнительная**

1. Степанов, Николай Федорович. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учеб. для вузов / Н. Ф. Степанов, 2001. - 519 с.
2. Иродов, И.Е. Квантовая физика Основные законы / И.Е. Иродов // М.: Лаборатория базовых знаний, 2001.

### **Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы**

1. IPRbooks [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система / группа компаний Ай Пи Эр Медиа . - Электрон. дан. - Саратов , [2019]. - Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru>.
2. ЮРАЙТ [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система / ООО Электронное издательство ЮРАЙТ. - Электрон. дан. – Москва , [2019]. - Режим доступа: <https://www.biblio-online.ru>.
3. Консультант студента [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система / ООО Политехресурс. - Электрон. дан. – Москва, [2019]. - Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/pages/catalogue.html>.
4. КонсультантПлюс [Электронный ресурс]: справочная правовая система. /Компания «Консультант Плюс» - Электрон. дан. - Москва :КонсультантПлюс, [2019].
5. База данных периодических изданий [Электронный ресурс] : электронные журналы / ООО ИВИС. - Электрон. дан. - Москва, [2019]. - Режим доступа: <https://dlib.eastview.com/browse/udb/12>.
6. Национальная электронная библиотека [Электронный ресурс]: электронная библиотека. - Электрон. дан. – Москва, [2019]. - Режим доступа: <https://нэб.рф>.
7. Электронная библиотека диссертаций РГБ [Электронный ресурс]: электронная библиотека / ФГБУ РГБ. - Электрон. дан. – Москва, [2019]. - Режим доступа: <https://dvs.rsl.ru>.
8. Федеральные информационно-образовательные порталы:  
Информационная система Единое окно доступа к образовательным ресурсам. Режим доступа: <http://window.edu.ru>  
Федеральный портал Российское образование. Режим доступа: <http://www.edu.ru>
9. Образовательные ресурсы УлГУ:  
Электронная библиотека УлГУ. Режим доступа :<http://lib.ulsu.ru/MegaPro/Web>  
Образовательный портал УлГУ. Режим доступа :<http://edu.ulsu.ru>

### **5. РАЗДЕЛЫ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ**

Название разделов и тем	Всего	Виды учебных занятий					Форма текущего контроля знаний
		Аудиторные занятия			Занятия в интерактивной форме	Самостоятельная работа	
		Лекции	Практические занятия, семинары	Лабораторные работы, практикумы			
Основные предпосылки квантовой механики	8	2	4			2	
Задачи, решаемые аналитически	16	4	8			4	
Приближенные методы решения уравнения Шредингера.	16	4	8			4	
Методы квантовой химии	16	4	8			4	
Применение групп симметрии в квантовой химии	16	4	8			4	
<b>ИТОГО</b>	<b>72</b>	<b>18</b>	<b>36</b>	<b>-</b>	<b>-</b>	<b>18</b>	

## 6. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ДИСЦИПЛИНЫ

### **Тема 1. Основные предпосылки квантовой механики**

Абсолютно черное тело. Внешний фотоэффект, соотношение Эйнштейна. Опыты Резерфорда, Девиссона и Джермера. Уравнение Луи де Бройля. Теория Бора. «Вывод» уравнения Шредингера.

### **Тема 2. Задачи, решаемые аналитически**

Свободная частица. Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно-высокими стенками. Частица в потенциальном ящике, вырожденные состояния. Жесткий ротатор. Линейный гармонический осциллятор. Атом водорода

### **Тема 3. Приближенные методы решения уравнения Шредингера**

Многоэлектронные системы. Принцип антисимметрии. Детерминант Слейтера. Вариационный метод. Вариационный метод Рунца. Теория возмущений (вырожденные и невырожденные состояния). Метод Хартри-Фока

#### **Тема 4. Методы квантовой химии**

Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод МО ЛКАО. Метод Гайтлера-Лондона. Имперические и полуэмперические методы

#### **Тема 5 Применение групп симметрии в квантовой химии**

Пространственная и точечная симметрия. Элементы симметрии. Теория групп. Группы симметрии. Закон композиции. Таблицы характеров. Правило отбора для дипольных переходов. Корреляционные диаграммы. Правило Вудворда-Хоффмана.

### **7. ВОПРОСЫ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ ПОДГОТОВКИ ПО ТЕМАМ КУРСА**

#### **Тема 1 Основные предпосылки квантовой механики**

Вопросы к теме

1. Почему квантовая теория пользуется вероятностным описанием поведения микрочастиц?
2. Какими свойствами обладает волновая функция микрочастицы?
3. Сформулируйте принцип суперпозиции в квантовой механике

#### **Тема 2 Задачи, решаемые аналитически**

Вопросы к теме

1. Принцип антисимметрии. Детерминант Слейтера.
2. Привести решение уравнения Шредингера для свободной частицы.
3. Привести решение уравнения Шредингера для частицы в одномерной и двухмерной потенциальной яме.

#### **Тема 3 Приближенные методы решения уравнения Шредингера**

Вопросы к теме

1. Изложить суть теоремы Виряла и вариационного метода.
2. В чем различие перекрывания интегралов  $S$  и  $S_2$  ?
3. Неэмперические и полуэмперические методы.
4. Пространственная и точечная симметрия.
5. Определение абстрактной математической группы.

#### **Тема 4 Методы квантовой химии**

Вопросы к теме



1. Основы теории представлений.
2. Закон композиции группы.
3. Группы симметрии.
4. Таблицы характеров.
5. Теория возмущений. невырожденный случай.
6. Теория возмущений. вырожденный случай.
7. Многоэлектронные атомы. Спектры.
8. Атомные термы. Спинатома.
9. Молекулярные орбитали.

### **Тема 5 Применение групп симметрии в квантовой химии**

Вопросы к теме

1. Процедура определения интегралов с помощью таблиц характеров.
2. Симметризация молекулярных орбиталей.
3. Правило Вудворда-Хоффмана.

### **КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (ВОПРОСЫ К ЗАЧЕТУ)**

1. Молекулярный гамильтониан и разделение электронного и ядерного движения.
2. Неадиабатические взаимодействия и способы их учета
3. Вариационный метод решения стационарного уравнения Шредингера.
4. Применение теории возмущений для решения стационарного уравнения Шредингера.
5. Принцип Бубнова-Галеркина
6. Поверхности потенциальной энергии многоатомной молекулы.
7. Выражения для матричных элементов между детерминантами Слейтера.
8. Классификация групп симметрии (точечных групп симметрии).
9. Дать формулировки большой и малой теорем Вигнера.
10. Ввести выражения для проекторов на неприводимые представления групп симметрии.
11. Метод Хартри-Фока-Рутаана (приближение МО ЛКАО).
12. Выбор систем базисных функций в неэмпирических методах.
13. Теория функционала плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона и уравнения Кона-Шэма.
14. Сформулируйте понятие о корреляционной энергии.