

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Кемеровский государственный университет»  
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан  
химического факультета

 / Мороз /  
« 25 » марта 2013 г.



**Рабочая программа дисциплины**  
***Квантовая механика и квантовая химия***

для специальности 020101.65-Химия (цикл ОПД.Ф.7),

факультет	химический		
курс	3		
семестр	5		
лекции	34 часа	экзамен	5 семестр
практические занятия	часов	зачет	___ семестр
лабораторные занятия	34 часа	курсовая работа	___ семестр
самостоятельные занятия	82 часа		

Всего часов: 150

Составитель: д.ф.-м.н., профессор Крашенинин В.И.

Кемерово 2013

Рабочая программа дисциплины « **Квантовая механика и квантовая химия** » федерального компонента цикла (**ОПД.Ф.7**) составлена в соответствии с требованиями Государственного образовательного стандарта второго поколения по специальности 020101.65 «Химия»

Рабочая программа дисциплины  
обсуждена на заседании кафедры химии твердого тела

Протокол № 12 от «12» февраля 2013 г.

Зав. кафедрой  Ю.А. Захаров

Одобрено методической комиссией химического факультета

Протокол № 7 от «20» марта 2013 г.

Председатель  О.Н. Булгакова

## 1. ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

В последнее время квантовая химия, являясь основой теоретической химии, стала необходимым элементом при обучении не только физико - химиков, но химиков - органиков и химиков - неоргаников. Первая часть курса посвящена основным представлениям квантовой теории и не требует предварительного знакомства с курсом квантовой механики,

Во второй части рассмотрены основные методы приближенного решения уравнения Шредингера. Третья часть посвящена теории и приложения группы симметрии,

Рабочая программа составлена на основании Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования для специальности 020101 “Химия”, в соответствии с **перечнем специализаций**.

**Задачи учебного курса:** изучение основных постулатов квантовой механики; изучение приближенных методов решение квантовомеханических задач; изучение электронного строения молекул; решение прикладных задач квантовой химии.

**Курс состоит** из лекционной части (34 часа), на которой представляется основной теоретических материал; лабораторных занятий (34 часа) для закрепления полученных знаний; самостоятельной работы студентов для изучения дополнительной литературы (82 часа).

**Контроль знаний** студента осуществляется еженедельной проверкой результатов работы на семинарских занятиях, проведением контрольных работ, коллоквиума и экзамена по окончании курса.

Для успешного решения проблем и изучения данной дисциплины необходимо привлечение следующих наук: “Высшая математика”, “Общая физика” (электричество и магнетизм), “Теоретическая физика” (основы квантовой механики, элементы статистической физики), “Физика твердого тела .”

Прослушав курс студенты будут знать основные постулаты квантовой механики и приближенные методы решения квантовомеханических задач, знать основные приближения, используемые при решении квантовохимических задач; иметь представление об электронном строении атомов и молекул; знать прикладные задачи квантовой химии

## 2. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН

№	Тема	Объем часов	Лекции	Практ	Лаб. Раб.	Рекоменд. литература	Самос. работа студ.	Формы контроля
1	2	3	4	5	6	7		6
1	Введение. Основные предпосылки квантовой механики. Кванты энергии и постоянная Планка.	8	2		2	1,14	4	
2	Спектры атома водорода. Теория Бора. Волны материи.	6	2		2	1,14	2	

3	Опыты Дэвиссона и Джермера. Закон о невозможных измерениях. “Вывод” уравнения Шредингера.	8	2		2	1,8,9	4	
4	Формулировка уравнения Шредингера для простейших систем. Свободная частица.	10	2		4	9	4	
5	Частица в одномерной потенциальной яме. Частица в потенциальном ящике. Теория свободных электронов и спектры сопряженных систем.	8	2			3,5,9,14	6	Контрольная работа (2 недели)
6	Жесткий ротатор. Гармонический осциллятор.	10	2		4	3,5,9.	4	
7	Атом водорода Свойства операторов и волновых функций. Коммутаторы. Математическое ожидание измеряемой величины. Принцип оптической симметрии. Детерминант Слейгера.	16	2		8	1,5,8,14	6	
8	Многоэлектронные системы. Орбитальный и собственный моменты импульса электрона. Магнитный момент. Магнетон.	10	2		2	5,9,14,18	6	Контрольная работа 14 недели

	тон Бора. Нормальный и аномальный эффект Зеемана. Бозоны и фермионы.							
9	Теорема Вириала, вариационный метод. Метод Ритца.	6	2			1,5,9,18	4	
10	Теория возмущений (невыврожденные и вырожденные состояния).	5	1			1,5,18	4	
11	Метод Хартри-Фока, самосогласованное поле.	7	1			5,18	6	
12	Развитие квантовой химии в СССР. Приближение Борна - Оппенгеймера. Метод МО ЛКАО.	10	2		4	1,5,15	4	
13	Метод Гайплера - Лондона. Полная волновая функция. Принцип запрета Паули. Полуэмпирические и неэмпирические методы.	10	2		4	1,5,6,10	4	
14	Элементы и операции симметрии. Основы теории групп. Таблицы умножения. Изоморфные группы. Генераторы группы. Группы	10	2		2	1,3,4	6	

	симметрии.							
15	Приводимые и неприводимые представления. Матричные представления операций симметрии.	9	2		1	1,3,4	6	
16	Таблицы характеров. Правила отбора.	7	2		1	1,4,17	4	
17	Правило Вудфорда и Хоффмана. Корреляционные диаграммы.	6	2			4,17	4	коллоквиум 5,14 неделя
18	Теория переходного комплекса. Построение поверхности потенциальной энергии.	6	2			5,9	4	Подготовка к зачету 17 неделя

### 3. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### СОДЕРЖАНИЕ ЛЕКЦИЙ

1. Введение. Определения квантовой механики и квантовой химии. Основные разделы теоретической химии.

2 час

2. Основные предпосылки квантовой механики. опыты Резерфорда и недостатки планетарной модели атома. Кванты энергии и постоянная Планка. Спектры атома водорода. Теория Бора. Волны материи. опыты Дэвиссона и Джермара. Закон о невозможных измерениях. Уравнение Шредингера. Формулировка уравнения Шредингера для простейших систем. Точное решение уравнения Шредингера (свободная частица; частица в одномерной потенциальной яме; частица в потенциальном ящике; теория свободных электронов и спектры сопряженных

систем; жесткий ротатор; гармонический осциллятор; атом водорода). Туннельный эффект.

10 часов

3. Свойства операторов: эрмитовость, линейность. Ортонормированные волновые функции. Математическое ожидание измеряемой величины. Коммутаторы. Принцип антисимметричности. Детерминант Слейтера.

2 часа

4. Многоэлектронные системы. Орбитальный и собственный моменты импульса и магнитные моменты. Магнетон Бора. Нормальный и аномальный эффекты Зеемана. Понятие бозонов и фермионов.

2 часа

5. Приближенные методы решения уравнения Шредингера. Теорема Вириала и вариационный метод. Метод Ритца. Теория возмущений с невырожденными и вырожденными состояниями. Метод Хартри - Фока.

4 часов

6. Развитие квантовой химии в России. Приближение Борна - Оппенгеймера. Метод МО ЛКАО (молекулярный ион водорода). Метод Гайтлера - Лондона (молекула водорода). Полная волновая функция. Принцип запрета Паули. Гибридизация. Полуэмпирические и неэмпирические методы квантовой химии.

4 часа

7. Точечные группы симметрии. Элементы и операции симметрии. Теория групп. Операции симметрии как элементы математической группы. Таблицы умножения. Понятие изоморфных групп. Генераторы группы. Приводимые и неприводимые представления. Матричные представления операций симметрии. Таблицы характеров. Симметрия уравнения Шредингера. Применение групп симметрии в квантовой химии (интегралы перекрывания; запрет по симметрии электронных переходов; симметрия атомных орбиталей; проекционный оператор). Правило Вудфорда и Хоффмана.

6 часов

8. Теория переходного комплекса. Координаты химической реакции и построение поверхности потенциальной энергии.

4 часа

## **Программа лабораторного практикума**

1. Порядки физических величин в квантовой механике.

2 час

2. Спектр атома водорода. Решение задач по теории Бора. Длина волны микрочастицы.

2 час

3. Решение задач на соотношения Гейзенберга. Формулировка уравнения Шредингера для различных систем.

2 часа

4. Вычисление значений функции плотности вероятности и вероятности.

2 часа

5. Свободная частица. Частица в одномерной и двухмерной потенциальной яме.

2 часа

6. Расчет спектров сопряженных систем

2 часа

7. Графическое построение орбиталей по волновым функциям.

2 часа

8. Вычисление измеряемых величин в квантовой механике. Вычисление коммутаторов.

4 часа

9. Решение задач на метод Ритца.

2 часа

10. Оператор Слейтера. D - функция.

2 часа

11. Вычисление интегралов для возмущенной системы.

2 часа

12. Определение энергии в методе МО ЛКАО

2 часа

13. Интегралы в методе Гайтлера - Лондона.

2 часа

14. Определение симметрии молекул. Построение таблиц умножения.

2 часа

15. Составление матричных представлений для различных базисов.

2 часа

16. Таблицы характеров. Применение проекционных операторов. Правило отбора.

2 часа



#### 4. УЧЕБНО - МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ ЛИТЕРАТУРА

а) основная литература

1. <http://e.lanbook.com/view/book/3150/> Цирельсон, Владимир Григорьевич. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие. 2010. - 496 с.
2. Ермаков, Алексей Иванович. Квантовая механика и квантовая химия [Текст]: учебн. пособие для вузов, М.: Изд. Юрайт, 2010. 555 с.
3. Задачник по квантовой химии и квантовой механике: учебное пособие / В. И. Крашенинин [и др.], Кемеровский государственный университет. - Кемерово, 2012. - 64 с.

б) дополнительная литература:

<b>Сведения об учебниках</b>			<b>Количество экз. в библиотеке на 01.2013 г.</b>
<i>Наименование, гриф</i>	<i>Автор</i>	<b>Год издания</b>	
1. Квантовая химия.- М.:Высшая школа.-1999	Грибов Л.А.	1999	32
2. Квантовая химия.- М.:Высшая школа.-1962	Давтян О.К.	1962	3
3. Задачи по квантовой химии и строению молекул. – М.:МГУ.-1987	Кукушкин А.Н.	1987	4
4. Квантовая химия.- М.:Мир.-1985	Флари П	1986	3
5. Группы симметрии. - М.:Мир.-1983	Флари П	1983	5
6. Курс квантовой химии.- Воронеж: Изд. Воронежского университета.-1981.	Мелешина АюМ.	1981	1
7. Основы квантовой химии - М.:Мир.-1979	Заградник Р., Полак Р.	1979	4
8. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. Т.1,2 / Под ред. Дж. Сигал. Сигал.- М.:Мир.-1980	Под ред. Дж. Сигал.	1980	Т.1-5 Т.2-5
9. Курс квантовой механики для химиков.- Воронеж: Изд. Воронежского университета.- 1980.	Мелешина АМ,	1980	15
10. Начала квантовой химии.- М.:Высш. шк.. 1989	Абаренков И.В.. Братцев. В.Ф., Ту-	1989	9

	луб А.В.		
11. Атомная физика.- М.6 Наука, 1989	Матвеев А.И.	1989	16
12. Симметрия глазами химика // Пер. с англ. Матрюкова И.М. .- М.:Мир.-1989	Харгиттай И., Харгиттай И.,	1989	2
13. Квантовая механика и квантовая химия.- М.:Мир.- 2001	Степанов Н.Ф.	2001	32
			<b>Количество экз. в библиотеке на 01.2013 г.</b>
<u>Наименование</u>	<u>Автор</u>	Год издания	
14 Основы химической кинетики Г. Эйринг // М.: Мир, 1983.	Г. Эйрин.	1983	4
15. Электрон глазами химика И. Дмитриев //Л.: Химия, 1983	И. Дмитриев	1983	10
16. Электроны в химических реакциях / Л. Салем // М.: Мир, 1985	Л. Салем	1985	3
<b>17. Иродов, И.Е. Квантовая физика Основные законы / И.Е. Иродов // М.: Лаборатория базовых знаний, 2001.</b>	И.Е. Иродов	2001	20

## 5. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Чем наблюдение микрообъекта принципиально отличается от наблюдения макрообъекта?
2. Почему квантовая теория пользуется вероятностным описанием поведения микрочастиц?
3. Каким условиям должна удовлетворять волновая функция частицы?
4. Сформулируйте принцип суперпозиции полей, волн?
5. Какой физический смысл в нормировке волн Де Бройля по Борну?
6. Сформулируйте свойства операторов?
7. Принцип антисимметричности. Детерминант Слейтера.
8. Запишите уравнение Шредингера в энергетическом состоянии.
9. Привести решение уравнения Шредингера для свободной частицы.

10. Привести решение уравнения Шредингера для частицы в одномерной и двухмерной потенциальной яме.
11. Изложить суть теоремы Вириала и вариационного метода.
12. Метод Ритца.
13. Теория возмущений с невырожденными и вырожденными состояниями. Метод Хартри - Фока.
14. Определение энергии в методе МО ЛКАО.
13. Интегралы в методе Гайтлера - Лондона.
14. Составление матричных представлений для различных базисов
15. Вычисление интегралов для возмущенной системы.
16. Определение симметрии молекул. Составление таблиц умножения.
17. Применение таблиц характеров, проекционных операторов. Правило отбора.