

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 26.03.2025 13:42:09
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В.Пекаревский
«___» _____ 20__ г.

Рабочая программа дисциплины
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленности программы магистратуры

Медицинская химия

Квалификация

Магистр

Форма обучения

Очная

Факультет **информационных технологий и управления**

Кафедра **математики**

Санкт-Петербург

2025

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы	4
3. Объем дисциплины.....	5
4. Содержание дисциплины.....	6
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий	6
4.2. Занятия лекционного типа	6
4.3 Занятия семинарского типа	7
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	8
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	9
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	9
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	9
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	9
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	9
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	10
10.1. Информационные технологии.....	10
10.2. Программное обеспечение.....	10
10.3. Базы данных и информационные справочные системы	10
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	10
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	10
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	11

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате освоения образовательной программы магистратуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ОПК-3 Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.2 Выполнение квантово-механических расчётов в области химии	Знать: основные принципы и положения квантовой механики и квантовой химии (ЗН-1); методы решения классических задач квантовой механики (ЗН-2); принципиальные основы приближённых методов квантовой основы и квантовой химии (ЗН-3). Уметь: находить основные характеристики квантовых систем (У-1); применять приближённые методы решения задач квантовой механики (У-2). Владеть: навыками постановки задач квантовой механики и методами их решения (Н-1)

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к дисциплинам обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» (Б1.О.04) и изучается на 2 курсе в 3-м семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Математика», «Физика», изученных в рамках программ бакалавриата.

Полученные в процессе изучения дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе и выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	3/108
Контактная работа с преподавателем:	56
занятия лекционного типа	18
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия	36
лабораторные работы	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	2
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	52
Контроль	-
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	2 РГР
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	Зачёт

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции/индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы		
1.	Основные понятия и математический аппарат квантовой механики	4	8		10	ОПК-3/ ОПК-3.2
2.	Точно решаемые задачи квантовой механики.	6	10		10	ОПК-3/ ОПК-3.2
3.	Водородоподобные ионы	4	10		20	ОПК-3/ ОПК-3.2
4.	Приближённые методы квантовой механики и квантовой химии	4	8		12	ОПК-3/ ОПК-3.2
ИТОГО		18	36		52	

4.2. Занятия лекционного типа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновацион ная форма
1	Проблемы описания экспериментально наблюдаемых явлений в рамках классической физики. Эрмитовы операторы в гильбертовом пространстве. Представление наблюдаемых самосопряжёнными операторами. Общий вид соотношения неопределённости Гейзенберга. Волновая механика Шрёдингера и подход Гейзенберга.	4	Групповая дискуссия
2	Стационарное уравнение Шрёдингера. Частица в «потенциальной яме», «туннельный эффект». Гармонический осциллятор, связь с проблемой теплоёмкости твёрдого тела. Учёт ангармонизма. Потенциалы межатомного взаимодействия.	6	Разбор конкретных ситуаций
3	Свойства оператора углового момента. Частица в сферически симметричном потенциальном поле. Уровни энергии дискретного и непрерывного спектра. Атомная система единиц.	4	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновацион ная форма
4	Метод Хартри-Фока. Метод функционала плотности.	4	
	Итого	18	

4.3 Занятия семинарского типа

4.3.1. Семинары, практические занятия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновацион ная форма
1	Понятие гильбертова пространства, примеры. Сопряжённые операторы. «Бра-кет» символика. Коммутатор операторов.	4	
1	Представление наблюдаемых операторами в гильбертовом пространстве. Среднее значение наблюдаемой и среднеквадратичное отклонение. Соотношение неопределённости. Эквивалентность подходов Шрёдингера и Гейзенберга. Чистые и смешанные состояния.	4	Мозговой штурм
2	Стационарное уравнение Шрёдингера. Стационарные состояния. Задача о частице в бесконечной потенциальной яме. Частица в конечной потенциальной яме.	4	
2	Гармонический осциллятор. Соответствие между квантовой и классической частицей. Проблема теплоёмкости твёрдого тела. Потенциал Морзе.	4	Групповая дискуссия
2	Преодоление барьера. Движение волнового пакета.	2	
3	Центр масс системы из двух частиц. Задача о частице в сферически симметричном потенциальном поле. Разделение переменных в уравнении Шрёдингера (в сферических координатах).	6	
3	Квантовые числа для водородоподобных ионов. Определение характеристик электрона в различных состояниях.	4	
4	Приближённые методы решения уравнения Шрёдингера. Метод Хартри и Хартри-Фока.	4	
4	Метод функционала плотности.	4	
	Итого	36	

4.3.2. Лабораторные занятия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
	не предусмотрены		

4.4. Самостоятельная работа обучающихся

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Ортогональность собственных функций самосопряжённых операторов.	10	Вопросы к зачёту
2	Нахождение уровней энергии и средних характеристик наблюдаемых для квантовой частицы.	10	РГР № 1, вопросы к зачёту
3	Определение средних значений характеристик электрона атома водорода в различных состояниях.	20	РГР № 2, вопросы к зачёту
4	Вариационные методы квантовой механики.	12	вопросы к зачёту
	Итого	52	

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте Медиа: <http://media.spbti.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачёта. К сдаче зачёта допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

Зачёт предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки знаний) и комплексная задача (для проверки умений и навыков).

При сдаче зачёта, студент получает два вопроса из перечня вопросов и одно практическое задание, время подготовки студента к устному ответу — до 45 мин.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) печатные издания:

1. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия: Учебное пособие для вузов по химическим спец. / В. И. Барановский. — М.: Academia, 2008. — 383 с.
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия: Учебное пособие для вузов по спец. ВПО 020101.65 «Химия» / А. И. Ермаков. — М.: Юрайт, 2010. — 555 с.
3. Мартинсон, Л. К. Квантовая физика : Учебное пособие для вузов по техническим направлениям и спец. / Л. К. Мартинсон, Е. В. Смирнов. — М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. — 527 с.

б) электронные учебные издания:

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 522 с. — ISBN 978-5-93208-518-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/172254> (дата обращения: 05.10.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул : учебное пособие / И. Майер ; художник Н. В. Зотова. — 4-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 387 с. — ISBN 978-5-93208-516-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/166732> (дата обращения: 05.10.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Учебный план, РПД и учебно-методические материалы: <http://media.spbti.ru>
электронно-библиотечные системы:

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;
«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Все виды занятий по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

10.1. Информационные технологии

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- взаимодействие с обучающимися посредством электронно-информационной образовательной среды.

10.2. Программное обеспечение

При выполнении РГР студенты используют пакет прикладных программ Mathcad.

10.3. Базы данных и информационные справочные системы

wolframalpha.com/examples/mathematics

11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для ведения лекционных и практических занятий используются аудитории кафедры математики.

При изучении соответствующих разделов курса используется компьютерный класс, оборудованный 16 персональными компьютерами, объединенными в сеть.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014 г.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ОПК-3	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)
			Зачтено (пороговый)
ОПК-3.2 Выполнение квантово-механических расчётов в области химии	Знает основные принципы и положения квантовой механики и квантовой химии (ЗН-1);	Ответы на вопросы №№ 1-10 к зачёту.	Демонстрирует правильное понимание основных понятий и принципов квантовой механики, допуская отдельные ошибки.
	Знает методы решения классических задач квантовой механики (ЗН-2);	Ответы на вопросы №№ 11-17 к зачёту.	Умеет решать классические задачи квантовой механики, допуская отдельные неточности и несущественные ошибки.
	Знает принципиальные основы приближённых методов квантовой основы и квантовой химии (ЗН-3).	Ответы на вопросы №№ 18-24 к зачёту.	Верно объяснять основные предположения и гипотезы, на которых базируются приближённые методы квантовой механики.
	Умеет находить основные характеристики квантовых систем (У-1);	Ответы на вопросы №№ 2-4 к зачёту. Выполнение РГР № 1 и РГР № 2.	Знает правила определения основных характеристики и правильно применяет их, допуская технические ошибки.
	Умеет применять приближённые методы решения задач квантовой механики (У-2).	Ответы на вопросы №№ 18-24 к зачёту.	Умеет ставить подбирать и обосновывать методы приближённого решения задач квантовой механики.
	Владеет навыками постановки задач квантовой механики и методами их решения (Н-1)	Ответы на вопросы №№ 11-12, 15-17 к зачёту. Выполнение РГР № 2.	Демонстрирует владение навыками постановки и решения задач, допуская отдельные ошибки.

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

по дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачета, результат оценивания – «зачтено», «не зачтено».

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

3.1 Вопросы к зачёту:

1. Линейные операторы в гильбертовом пространстве. Собственные значения операторов.
2. Самосопряжённые операторы, их основные свойства.
3. Связь между эрмитовыми операторами и измеряемыми значениями наблюдаемых.
4. Коммутирующие операторы. Коммутант операторов.
5. Соотношение неопределённости Гейзенберга.
6. Операторы импульса, кинетической энергии, потенциальной энергии, момента импульса.
7. Эволюция состояния. Представление Гейзенберга.
8. Временное и стационарное уравнение Шредингера.
9. Волновые функции. Свойства волновых функций одномерного уравнения Шредингера.
10. Матричное представление операторов.
11. Частица в «потенциальной яме».
12. Гармонический осциллятор. Уровни энергии и волновые функции.
13. Квантовое и классическое выражение для теплоёмкости системы гармонических осцилляторов.
14. Учёт ангармонизма. Потенциалы межатомного взаимодействия. Энергия диссоциации.
15. Атом водорода. Центр масс системы из двух частиц. Выражение для гамильтониана.
16. Разделение переменных в стационарном уравнении Шредингера для атома водорода.
17. Квантовые числа и волновые функции для водородоподобного иона.
18. Система невзаимодействующих тождественных частиц. Волновые функции бозонов и фермионов. Принцип Паули.
19. Одноэлектронное приближение.
20. Метод Хартри.
21. Метод Хартри-Фока.
22. Метод Хартри и Хартри-Фока для атома.
23. Метод молекулярных орбиталей.
24. Метод функционала плотности Кона-Шэма.

К зачёту допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче экзамена, студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше, и практическое задание, аналогичное заданиям расчётно-графических работ. Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 45 мин.

3.2. Содержание расчётно-графических работ (типовые варианты)

Расчётно-графическая работа № 1

1. Вычислите коммутатор операторов z и $\hat{L}_x$.
2. Определите среднее значение координаты x и проекции импульса p_x частицы,

состояние которой в некоторый момент времени определяется функцией

$$\psi(x) = A \exp(ikx - x^2/a^2).$$

3. Частица массой m находится в одномерном потенциальном поле

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq l, \\ U_0, & x \notin [0; l]. \end{cases}$$

Определите минимальное значение величины $l^2 U_0$, при котором появляется три дискретных уровня энергии.

Расчётно-графическая работа № 2

Для электрона атома водорода в состоянии $4p$:

1. Выпишите полную волновую функцию.
2. Постройте радиальную функцию плотности вероятности.
3. Найдите наиболее вероятное и среднее значение расстояния до ядра, а также среднеквадратичное отклонение для этой величины.

4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СТП

СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКВД. Порядок проведения зачетов и экзаменов.