МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
ДОНЕЦКОЙ НАРОДНОЙ РЕСПУБЛИКИ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ:
Первый проректор
_____ А. А. Каракозов
(подпись)

«31» марта 2023 года

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.07.02 Квантовая химия

Направление подготовки: 18.03.01 "Химическая технология»
(код и наименование направления / специальности)

Наименование профиля: «Химическая технология химико-фармацевтических препаратов и косметических средств».
наименование профиля / магистерской программы / специализации)

Программа: бакалавриат
(бакалавриат, магистратура, специалитет)

Форма обучения: очная, заочная
(очная, заочная, очно-заочная)

Форма обучения:	очная	заочная
Семестр(ы)	6	6
Общая трудоёмкость в з.е./часах	4,0 / 144	4,0 / 144
Контактная работа (час.)	55	12
Лекции (час.)	17	2
Практические (семинарские) занятия (час.)	34	4
Лабораторные работы (час.)	–	-
Самостоятельная работа (час.), в том числе	53	96
Курсовой проект/работа (семестр)	–	-
Контроль (экзамен/зачёт) (час.):	Экзамен 36	Экзамен 36

Донецк, 2023 г.

Рабочая программа дисциплины «Квантовая химия» составлена в соответствии с учебным планом по направлению подготовки (специальности) 18.03.01 "Химическая технология", направленность (профиль): «Химическая технология химико-фармацевтических препаратов и косметических средств» для 2023 года приема по очной и заочной форме обучения.

Составитель:
доцент кафедры «Общая, физическая и органическая химия»
к.х.н.

_____ Е. И. Волкова
(подпись)

Рабочая программа рассмотрена и принята на заседании кафедры «Общая, физическая и органическая химия»

Протокол от «20» 03 2023 года № 8

Заведующий кафедрой _____ Волкова Е. И.
(подпись) (Ф.И.О.)

Рабочая программа одобрена учебно-методической комиссией ГОУ ВПО «ДОННТУ» по направлению подготовки 18.03.01 "Химическая технология"

Протокол от «24» марта 2023 года № 3

Председатель _____ Шаповалов В. В.
(подпись) (Ф.И.О.)

Рабочая программа продлена для 20___ года приёма на заседании кафедры «Общая, физическая и органическая химия»
Протокол от «_____» _____20___ года № _____

Заведующий кафедрой _____ _____
(подпись) (Ф.И.О.)

Рабочая программа продлена для 20___ года приёма на заседании кафедры «Общая, физическая и органическая химия»
Протокол от «_____» _____20___ года № _____

Заведующий кафедрой _____ _____
(подпись) (Ф.И.О.)

1. ОБЪЕКТ, ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью дисциплины "Квантовая химия" является получение теоретических знаний о современных представлениях квантовой химии, о методах расчета пространственной и электронной структуры молекул, а также приобретение умений и навыков работы с комплексами квантово-химических программ для решения задач, стоящих перед теоретической и экспериментальной химической наукой.

В результате освоения дисциплины студент должен:

знать:

- основные современные методы квантовой химии (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности),

- иметь представления о приближениях и допущениях, использованных при разработке этих методов,

- иметь представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры и химических реакций

уметь:

- определять необходимую информацию для расчета электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов;

- ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов

владеть:

- навыками квантово-химических расчетов физико-химических характеристик веществ;

- навыками квантово-химического моделирования химических реакций

Перечисленные результаты обучения являются основой для формирования следующих компетенций:

- Готовность и способность использовать знание свойств химических элементов, соединений и материалов на их основе для решения задач профессиональной деятельности. Организация работ по изучению и внедрению научно- технических достижений, передового отечественного и зарубежного опыта в производстве (ПК-4).

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В ОСНОВНОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЕ

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1 дисциплин (модулей) учебного плана.

Учебная дисциплина «Квантовая химия» имеет связи со следующими естественно-научными дисциплинами: физика, общая и неорганическая химия, физическая и коллоидная химия, органическая химия, основы косметологии.

3. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

3.1. Распределение учебных часов по темам дисциплины и видам занятий

Наименование тем (содержательных модулей)	Количество часов (очная/заочная форма)				
	Всего	В том числе			
		Лекции	Практ	Лабор.	СРС
Тема 1. Введение. Основные этапы развития квантовой химии.	11/14	2/0	2/0		7/14
Тема 2. Основные постулаты квантовой механики.	16/14	2/0	6/0		8/14
Тема 3. Принципы соответствия и операторы квантовой механики	16/17	2/1	6/2		8/14
Тема 4. Теория возмущений. Квантовые переходы между стационарными состояниями.	13/14	2/0	4/0		7/14
Тема 5. Система тождественных частиц.	15/15	4/0	4/1		7/14
Тема 6. Электронное строение атома.	16/16	2/1	6/1		8/14
Тема 7. Квантовохимическое описание химических реакций.	17/12	3/0	6/0		8/12
Контактная работа (дополнительная)	4/6				
Курсовая работа (проект)					
Итого по видам занятий	104/102	17/2	34/4	-	53/96
Контроль	36/36				
Итого:	144/144				

Формирование компетенций в результате освоения тем дисциплины

Компетенции	Темы дисциплины, нацеленные на выработку компетенции
ПК-4	Темы 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7

3.2. Лекции

Тема 1. Введение. Основные этапы развития квантовой химии.

Содержание темы 1:

Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Квантовая химия, как основа теоретического фундамента современной химической науки.

Литература к теме 1: [1, 2, 3, 4]

Тема 2. Основные постулаты квантовой механики.

Содержание темы 2:

Волновые функции, их основные свойства. Вероятности результатов измерения физических величин, средние значения наблюдаемых величин.

Плотность вероятности нахождения частиц в отдельных точках пространства. Принцип суперпозиции состояний.

Математический аппарат квантовой механики.

Операторы и их свойства. Собственные функции (СФ) и соответствующие собственные значения (СЗ). Эрмитовы операторы, их СФ и СЗ. Вырождение. Спин: операторы, собственные значения, собственные функции. Правила сложения моментов импульсов. Матричное представление операторов.

Литература к теме 2 [1, 2, 3, 4]

Тема 3. Принципы соответствия и операторы квантовой механики.

Содержание темы 3:

Оператор Гамильтона. Соотношение неопределенностей. Соотношение неопределенности для энергии. Дополнительность, соответствие и методология изучения микромира

Теория момента импульса. Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса. Спин: операторы, собственные значения, собственные функции. Правила сложения моментов импульсов.

Уравнение Шредингера (УШ). Стационарное УШ. Дискретный и непрерывный спектры. УШ для атомных и молекулярных систем. Уравнение непрерывности.

Формулировка уравнения Шредингера для простейших систем. Водородоподобные орбитали, их радиальные и угловые компоненты. Электронная плотность для атома водорода в различных состояниях.

Литература к теме 3: [1, 2, 3, 4]

Тема 4. Теория возмущений. Квантовые переходы между стационарными состояниями.

Содержание темы 4:

Возмущения, не зависящие от времени. Секулярное уравнение. Возмущения, зависящие от времени. Переходы под влиянием возмущения, действующего в течение конечного времени. Переходы в непрерывном спектре. Соотношение неопределенности для энергии. Потенциальная энергия как возмущение.

Переходы под влиянием возмущения, действующего в течение конечного времени. Переходы в непрерывном спектре. Соотношение неопределенности для энергии. Потенциальная энергия как возмущение.

Явление квантового перехода. Квантовые переходы под влиянием световой волны. Правило отбора для электронов в атоме. Интеркомбинационный запрет.

Литература к теме 4: [1, 2, 3, 4]

Тема 5. Система тождественных частиц.

Содержание темы 5:

Волновая функция системы тождественных частиц. Антисимметризация волновой функции. Волновая функция многоэлектронной системы в

одноэлектронном приближении. Средняя энергия в одноэлектронном приближении.

Основные приближения квантовой химии. Адиабатическое приближение.

Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод конфигурационного взаимодействия

Модель независимых электронов.

Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Основные пути введения приближений: упрощение аналитического вида пробных функций: приближенное вычисление интегралов, параметризация на основе экспериментальных данных. Одноэлектронное приближение.

Литература к теме 4: [1, 2, 3, 4]

Тема 6. Электронное строение атома.

Содержание темы 6:

Конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Учет симметрии атома при построении волновых функций различных состояний. Классификация состояний и классификация молекулярных орбиталей по симметрии σ, π – орбитали. π-электронное приближение. Связывающие и разрыхляющие орбитали

Классификация состояний и классификация молекулярных орбиталей по симметрии σ, π–орбитали. π-электронное приближение. Связывающие и разрыхляющие орбитали.

Теорема вириала, баланс энергии при образовании молекулы. Запрет пересечения, максимальное перекрывание. Рассмотрение молекулы H_2 в методах МО и ВС. Сравнение методов МО и ВС.

Модель свободных электронов (СЭ) в методе МО. Модель МО и зонная модель, электронный газ. Модель СЭ и металлическая связь. Электронно-колебательные взаимодействия. Эффект Яна-Теллера.

Межмолекулярные взаимодействия и их описание в квантовой химии. Ориентационная и индукционная составляющие. Дисперсионное взаимодействие Ван-дер-Ваальсовские комплексы. Водородная связь.

Литература к теме 6: [1, 2, 3, 4]

Тема 7. Квантовохимическое описание химических реакций.

Содержание темы 7:

Пути химических реакций. Поверхности реакций и их свойства. Термодинамические параметры реакции. Электронный отбор по орбитальной симметрии. Роль неадиабатических процессов при химических реакциях. Переходное состояние.

Молекулярная спектроскопия. Феноменологическое описание.

Ядерный квадрупольный резонанс (ЯКР), ядерный магнитный резонанс (ЯМР), электронный парамагнитный резонанс (ЭПР). Спектроскопия комбинационного рассеяния света (спетроскопия КР).

Литература к теме 7: [1, 2, 3, 4]

3.3. Практические (семинарские) занятия

№ п/п	Тема занятия	Объем, час Очн/заочн.	Литература
1	Тема 1. Введение. Основные этапы развития квантовой химии.	2/0	[5, 6]
2	Тема 2. Основные постулаты квантовой механики.	6/0	[5, 6]
3	Тема 3. Принципы соответствия и операторы квантовой механики	6/2	[5, 6]
4	Тема 4. Теория возмущений. Квантовые переходы между стационарными состояниями.	4/0	[5, 6]
5	Тема 5. Система тождественных частиц.	4/1	[5, 6]
6	Тема 6. Электронное строение атома.	6/1	[5, 6]
7	Тема 7. Квантовохимическое описание химических реакций.	6/0	[5, 6]
Итого:		34/4	

3.4. Лабораторные работы

Учебным планом лабораторные занятия не предусмотрены

3.5. Самостоятельная работа студента

№ п/п	Виды самостоятельной работы студента	Объем, час. очн/заоч
1	Изучение лекционного материала (не менее 50% от объема лекций)	25/51
2	Подготовка к лабораторным работам (не менее 50% от объема аудиторных лабораторных занятий)	-/-
3	Подготовка к практическим работам (не менее 50% от объема аудиторных практических занятий)	32/60
4	Выполнение курсового проекта (36 часов)	-
5	Выполнение курсовой работы (27 часов)	-
6	Выполнение индивидуального задания (не менее 9 часов)	0/9
Итого:		53/96

3.6. Курсовой проект (работа), индивидуальное задание

Для студентов очной формы обучения курсовой проект (работа) и индивидуальное задание по дисциплине учебным планом не предусмотрены.

Для студентов заочной формы обучения по дисциплине предусмотрено выполнение индивидуального задания (контрольной работы).

Объем учебной нагрузки при выполнении индивидуального задания (контрольной работы студента-заочника) – 9 часов. Задание на контрольную работу выбирается студентом-заочником в соответствии с методическими указаниями [4], согласовывается с преподавателем и выполняется по методическими рекомендациям [4].

4. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

4.1. Критерии и шкалы для интегрированной оценки уровня сформированности компетенций

Составляющая компетенции – полнота знаний

– нулевой уровень: неверные, не аргументированные, с множеством грубых ошибок ответы на вопросы / ответы на два вопроса из трех полностью отсутствуют. Уровень знаний ниже минимальных требований;

– пороговый уровень: даны недостаточно полные, точные и аргументированные ответы на вопросы. Плохо знает термины, определения и понятия; основные закономерности, соотношения, принципы. Допущено много негрубых ошибок;

– средний уровень: Даны достаточно полные, точные и аргументированные ответы на вопросы. В целом знает термины, определения и понятия; основные закономерности, соотношения, принципы. Допущено несколько негрубых ошибок;

– продвинутый уровень: даны полные, точные и аргументированные ответы на вопросы. Знает термины, определения и понятия; основные закономерности, соотношения, принципы. Допущено несколько негрубых ошибок;

– высокий уровень: даны полные, точные и аргументированные ответы на вопросы. Знает термины, определения и понятия; основные закономерности, соотношения, принципы. Допущено несколько неточностей.

Составляющая компетенции – умения

– нулевой уровень: полное отсутствие понимания сути методики решения задачи, допущено множество грубейших ошибок / задания не выполнены вообще;

– минимальный уровень: слабое понимание сути методики решения задачи, допущены грубые ошибки. Решения не обоснованы. Не умеет использовать нормативно-техническую литературу.

– пороговый уровень: достаточное понимание сути методики решения задачи, допущены ошибки. Решения не всегда обоснованы. Умеет использовать нормативно-техническую литературу. Слабо ориентируется в специальной научной литературе, нормативно-правовых актах;

– средний уровень: в целом понимает суть методики решения задачи, допущены ошибки. Решения не всегда обоснованы. Умеет использовать нормативно-техническую и специальную научную литературу, нормативно-правовые акты;

– продвинутый уровень: в целом понимает суть методики решения задачи, допущены неточности. Способен обосновать решения. Умеет использовать нормативно-техническую и специальную научную литературу, нормативно-правовые акты;

– высокий уровень: понимает суть методики решения задачи. Способен обосновать решения. Умеет использовать нормативно-техническую и специальную научную литературу, передовой зарубежный опыт.

Составляющая компетенции – владение навыками

– нулевой уровень: не демонстрирует владение навыками выполнения профессиональных задач. Не может выполнить задания;

– минимальный уровень: не демонстрирует владение навыками выполнения профессиональных задач. Испытывает существенные трудности при выполнении отдельных заданий;

– пороговый уровень: владеет навыками выполнения профессиональных задач на пороговом уровне. Задания выполняет медленно и некачественно;

– средний уровень: владеет навыками выполнения профессиональных задач. Задания выполняет на среднем уровне по быстроте и качеству;

– продвинутый уровень: владеет уверенными навыками выполнения профессиональных задач. Быстро и качественно выполняет задания, иногда допуская незначительные погрешности;

– высокий уровень: владеет уверенными навыками выполнения профессиональных задач. Быстро и качественно выполняет задания, при необходимости демонстрируя творческий подход.

Обобщенная оценка сформированности компетенций

– нулевой уровень: на нулевом уровне сформированы: все составляющие; одна или две из трёх, остальные – на более высоком уровне;

– минимальный уровень: на минимальном уровне сформированы: все составляющие; одна или две из трёх, остальные – на более высоком уровне;

– пороговый уровень: на пороговом уровне сформированы: все составляющие; одна или две из трёх, остальные – на более высоком уровне;

– средний уровень: на среднем уровне сформированы: все составляющие; одна или две из трёх, остальные – на более высоком уровне;

– продвинутый уровень: на продвинутом уровне сформированы: все составляющие; одна или две из трёх, остальные – на высоком уровне;

– высокий уровень: на высоком уровне сформированы все составляющие компетенций.

4.2. Вопросы к экзамену

1. Опишите эксперименты, в которых проявляются наиболее полно особенности поведения микрочастиц по сравнению с поведением макрообъектов?

2.Фундаментальное значение постулатов Бора.

3. Карта распределения электронной плотности в заданном сечении молекулы и методы ее построения.

4. Что такое боровский радиус атома и как он связан с представлением о распределении электронной плотности в пространстве вокруг ядра атома и выбранной системой координат?

5. Физический смысл волновой функции.

6. Принципиальное различие волновой функции свободно движущейся частицы и частицы, находящейся в замкнутом пространстве.

7. Какая величина сохраняется неизменной при переходе от классического уравнения движения к уравнению Шрёдингера?

8. Отличие уравнения Шрёдингера для ситуации, которая может развиваться во времени, от стационарного уравнения Шрёдингера.

9. Значение расчетов молекулярных спектров для квантовой химии.

10. В каких случаях удается сопоставить результат квантово-химического расчета с экспериментом с наибольшей точностью и наибольшей близостью рассчитываемой модели к экспериментальным данным?

11. Основные свойства матричных элементов для чисто электронных переходов.

12. Как вероятность электронных переходов связана со спиновыми состояниями и симметрией многоатомной молекулы?

13. Возможно ли в обычном приближении количественно оценить вероятности переходов между синглетными и триплетными состояниями?

14. Определение колебательных уровней энергии.

15. Классификация колебательных уровней энергии и соответствующих переходов.

16. Основные переходы обертона и составные частоты.

17. Какую роль играет симметрия многоатомной молекулы при колебаниях?

18. Нормальные колебания.

19. Что означает форма нормальных колебаний?

20. Можно ли «увидеть» форму нормальных колебаний, опираясь на соответствующие квантовые расчеты?

4.3. Пример экзаменационного билета

ГОУВПО «Донецкий национальный технический университет»

Уровень высшего профессионального образования _____бакалавриат_____.
Направление подготовки __18.03.01 "Химическая технология"_____.
Специальность ____ФПК _____. Семестр _____шестой_____.
Учебная дисциплина_____Квантовая химия_____.

Билет № 1

1. Основные свойства матричных элементов для чисто электронных переходов.
2. Фундаментальное значение постулатов Бора.

Утверждено на заседании кафедры ОФОХ_____.Протокол №___ от "___"_____20__ г.
Зав. кафедрой_____ Экзаменатор_____

4.4. Критерии оценивания экзаменационной работы по дисциплине «Квантовая химия»

Экзамен проводится письменно по билетам. Билет содержит два вопроса, требующих конкретного ответа.

Заданиям присваиваются следующие весовые коэффициенты: 0,5; 0,5. Сумма весовых коэффициентов равна единице.

Ответ на каждое задание оценивается по 100-бальной шкале.

Оценка «100» ставится в случае полного системного раскрытия вопроса без каких-либо неточностей. Баллы снимаются, если в ответе упущены какие-либо второстепенные моменты (до 10 баллов), допущены несущественные неточности (до 10 баллов), допущены существенные неточности при правильном ответе в целом (до 25 баллов), при недостаточном представлении материалов (баллы снимаются как процент недостающего материала с учетом его значимости).

Итоговая оценка за экзамен рассчитывается как сумма произведений оценок за каждое задание на их весовой коэффициент.

Полученная оценка по 100-балльной шкале определяет оценку по национальной шкале и шкале ESTS.

Перевод оценки из 100-балльной шкалы в государственную и ECTS осуществляется в соответствии со шкалой, приведенной в «Положении об организации учебного процесса в Донецком национальном техническом университете», утверждённом приказом ДОННТУ №337-14 от 02.05.2018 г.

4.5. Критерии оценивания уровня усвоения учебного материала дисциплины «Квантовая химия»

Оценивание уровня освоения студентом учебного материала дисциплины «**Квантовая химия**» производится в ходе текущего контроля и промежуточной аттестации (семестрового контроля).

Текущий контроль знаний студентов очной формы обучения производится по результатам устных и письменных опросов в ходе проведения практических занятий. Максимальное число баллов текущего контроля – 50 баллов.

Промежуточная аттестация по результатам освоения дисциплины в семестре проводится в форме семестрового экзамена. Форма проведения экзамена – письменная. Экзаменационный билет включает в себя 3 вопроса. При оценивании студента на экзамене преподаватель руководствуется критериями, приведенными в таблице.

Максимальное количество баллов за ответ на вопрос экзаменационного билета засчитывается студенту в случае, если ответ подтверждает владение студентом знаниями в полном объеме учебной программы.

В случае, если ответ на вопрос не в полной мере отвечает приведенным требованиям, студенту засчитывается количество баллов, равное 15. При отсутствии правильного ответа на поставленный вопрос студент получает 0 баллов.

Таблица – Распределение баллов по семестровому экзамену

Форма контроля		Максимально возможное количество баллов
Ответ на вопросы экзаменационного билета	вопрос 1	25
	вопрос 2	25
ИТОГО:		**50**

Итоговая оценка определяется путем суммирования количества баллов по результатам текущего контроля и количества баллов по результатам семестрового экзамена. **Максимально возможное количество баллов – 100**.

Полученная оценка по 100-балльной шкале определяет оценку по государственной шкале и шкале ECTS:

Сумма баллов по 100-бальной шкале	Оценка по шкале ECTS	Оценка по государственной шкале
90-100	A	Отлично
80-89	B	Хорошо
75-79	C	
70-74	D	Удовлетворительно
60-69	E	
35-59	FX	Неудовлетворительно
0-34	F*	

* – с обязательным повторным изучением дисциплины.

4.6. Примерная тематика индивидуальных заданий

Задача 1.1. Вычислить скорость и кинетическую энергию электрона при температурах 300К и 500К.

Задача 1.2. Представьте в графической форме законы смещения Вина, Рэнея-Джинса и Планка при температуре 1200К до частоты $6\cdot10^{14}$ Гц. В законе Вина примите $\alpha = 8nh / e^3$ и $\beta = h / k$.

Задача 1.3. Покажите, что закон Планка в пределе низких частотсводится к закону Рэлея-Джинса, а в пределе высоких частот – к закону Вина.

Задача 1.4. Вычислите кинетическую энергию, импульс и дебройлевскую длину волны для каждого из следующих случаев:

а) пуля массой 10 г, движущаяся со скоростью 500 м/с;

б) черепаха массой 1 кг, движущаяся со скоростью 1 см/с;

в) человек массой 90 кг, движущийся со скоростью 2 м/с;

г) самолет массой 5000 кг, движущийся со скоростью 100 м/с;д) земля при движении вокруг Солнца;

е) электрон, движущийся со скоростью $7\cdot10^6$ см/с;

ж) электрон, движущийся со скоростью $2 \cdot 10^{10}$ см/с (соответствует скорости электрона в атоме цинка при n = 1);

з) нейтрон, движущийся со скоростью $1 \cdot 10^{7}$ см/с.

Задача 1.5. Покажите, что на боровских орбитах укладывается целое число дебройлевских волн.

Задача 1.6. Определите скорости электрона в ионе He^{+} на боровских орбитах при n =1,2 и 3.

Задача 1.7. Определите, какие переходы электрона в атоме водорода обеспечивают свечение синее, желтое и красное.

Задача 1.8. Вычислите постоянную Ридберга, используя выкладки теории Бора.

Задача 1.9. Радиус первой боровской орбиты составляет 0,529А. Вычислите неопределенность импульса и сравните с его значением. Можно ли употреблять слово орбита?

Задача 1.10. Определите длину волны фотона, испускаемого электроном при переходе его с 4 на 1 уровень в атоме водорода.

Задача 2.1. Как связана де-бройлевская длина волны электрона ватоме водорода с квантовым числом на 1 и 2?

Задача 2.2. Во сколько раз масса электрона больше массы фотона с длиной волны 300 нм?

Задача 2.3. Вычислите кинетическую энергию электрона, с которой вылетают с поверхности металла при облучении его фотонами с длиной волны 200 нм, если работа выхода составляет 3 эВ.

Задача 2.4. Вычислите кинетическую энергию, де-бройловскую длину волны электрона при температуре 300 и 500К.

Задача 2.5. Для первых двух уровней атома водорода в рамках теории Бора вычислите кинетическую и потенциальную энергии.

Задача 2.6. Пучок электронов, выстреливаемый электронной пушкой, летит со скоростью 10^{7} см/с в горизонтальном направлении, диаметр его составляет 5 мм. После щели (см. рисунок) пучок попадает в электрическое поле, вектор напряженности которого направлен вертикально. В отсутствие поля пучок попадает в центр мишени с диаметром 5 см, находящейся на расстоянии 50 см от щели. Определите значение напряженности электрического поля, при котором центр пучка попадет в край мишени.

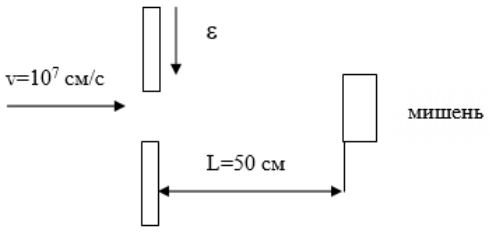

Рис. к задаче 2.6

Задача 2.7. Еще одна теоретическая модель для описания спектров и потенциалов ионизации атомов щелочных металлов основывается на предположении, что единственный валентный ns-электрон в этих атомах находится на водородоподобной орбите вокруг “экранированного” ядра (т. е. ядро, заряд которого изменен внутренними электронами) с эффективным зарядом Z-s, где s – "постоянная экранирования”. Исходя из потенциала ионизации ns- электрона, вычислите постоянную экранирования и энергию перехода (n+1)s←ns в атомах Li и Na.

Задача 2.8. Частота и масса осциллятора составляет соответственно 10^{13} c^{-1} и 10^{-25} г. Определить численное значение коэффициента упругой силы.

Задача 2.9. Определить максимальное значение скорости движения осциллятора с длиной волны 10^{-5} м и массой 10^{-24} г.

Задача 2.10. Записать гамильтониан для следующих систем (начало координат находится вне системы):а) атом водорода;

б) молекула водорода;

в) два электрона и два протона;г) атом бериллия;

д) атом бора; ж) атом лития;

з) молекула гидрида лития.

Задача 3.1. Покажите, что значение функции плотности вероятности свободной частицы не зависит от координаты.

Задача 3.2. Постройте зависимость волновой функции от координаты и функцию плотности вероятности для частицы в одномерной потенциальной яме для n=1,2,3.

Задача 3.3. Вычислите вероятность нахождения свободной частицы на интервале $0 \div \infty$.

Задача 3.4. Что общего между волновой функцией и длинойволны Луи де Бройля (рассмотрите на примере свободной частицы)?

Задача 3.5. Вычислите вероятность нахождения электрона:

а) на интервале 1/4a ÷ 3/4a в одномерной потенциальной яме (a – длина ямы) на первых трех энергетических уровнях;

б) в кубе с ребром ½ a, находящимся по центру кубического потенциального ящика на первых трех уровнях.

Задача 3.6. Запишите волновую функцию свободной частицы для трехмерного случая.

Задача 3.7. Вычислите вероятность нахождения жесткого ротатора в интервале углов $0 \div \pi$.

Задача 3.8. Известно, что длина волны излучения квантового осциллятора при переходе его с первого на нулевой уровень составляет 2200 нм. Вычислите энергию фотона в единицах эВ.

Задача 3 .9. Вычислите приведенную массу в атоме водорода. Во сколько раз она превышает массу свободного электрона?

Задача 3.10. В атоме водорода Н. Бор считал орбиты плоскими, поэтому для вычисления кинетической энергии электрона можно использовать модель жесткого ротатора. Для первой боровской орбиты вычислите значение

кинетической энергии и сравните его со значением $m\upsilon^2/z$, где υ – скорость. Объясните результат.

Задача 4.1.

Написать матричные представления и определить характеры для базисов: точка на плоскости xy с координатами x=1, y=1 в группе C_{2v}

Задача 4.2.

Написать матричные представления и определить характеры для базисов: точка на плоскости xy с координатами x=1, y=1, z = 1 в группе C_{3v}.

Задача 4.3.

Определить прямые произведения в группе C_{3v} A_1xA_2, A_2xE.

Задача 4.4.

Определить прямые произведения в группе C_{2v} A_2xB_1, $A_2\times B_1$, $A_2\times B_2$, $B_1\times B_2$

Задача 4.5.

На примерах групп C_{2v} и C_{3v} показать, что выполняются соотношения

$$\sum \chi_i(R)\chi_j(R) = 0,$$

$$\sum \chi_i(R)\chi_i(R) = h.$$

Задача 4.6.

Какие неприводимые представления группы C_{2v} содержаться в следующих приводимых с характеристиками:

а) $\chi_i = 3 \quad -1 \quad -1 \quad -1$

б) $\chi_i = 2 \quad 0 \quad 0 \quad -2$

в) $\chi_i = 2 \quad -2 \quad 0 \quad 0$

г) $\chi_i = 9 \quad -1 \quad 0 \quad 3$

Задача 4.7.

Для абстрактной математической группы шестого порядка записать закон композиции, на основании которого с помощью преобразований подобия разбить элементы групп на классы.

Задача 4.8.

Базисами каких неприводимых представлений являются p_x, p_y, p_z, x, y, z в группе C_{20}?

Задача 4.9.

В группе перестановок шестого порядка для каждого элемента определить обратный.

Задача 4.10.

Для группы перестановок второго порядка построить таблицу умножений

4.7 Курсовое проектирование - учебным планом курсовое проектирование не запланировано

5. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

I. Основная:

Ширяев, А. К. Квантовая механика и квантовая химия : учебно-методическое пособие / А. К. Ширяев. — Самара : Самарский государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2017. — 121 с. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/90518.html

1. Бурмистрова, Н. А. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие для студентов, обучающихся по направлению подготовки 04.03.01 «Химия» / Н. А. Бурмистрова, М. В. Пожаров, М. П. Смотров. — Саратов : Издательство Саратовского университета, 2020. — 68 с. — ISBN 978-5-292-04637-0. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/106265.html

II. Дополнительная:

2. Артамонова, О. В. Химия твердого тела : учебное пособие / О. В. Артамонова. — Москва : Ай Пи Ар Медиа, 2021. — 168 с. — ISBN 978-5-4497-1125-0. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/108355.html

3. Кротова, И. В. Прикладная химия : учебное пособие / И. В. Кротова. — Красноярск : Сибирский федеральный университет, 2020. — 148 с. — ISBN 978-5-7638-4215-9. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/100090.html

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Методические указания, изданные в ДОННТУ:

5. Методические указания для самостоятельной работы и выполнения индивидуальных заданий по дисциплине "Квантовая химия" [Электронный ресурс] : для обучающихся направления подготовки 18.03.01 "Химическая технология", всех форм обучения / ГОУ ВПО «ДОННТУ», Кафедра общей, физической и органической химии ; ГОУВПО "ДОННТУ", Каф. общ., физ. и орган. химии ; сост. Е. И. Волкова. - 737 Кб. - Донецк : ГОУВПО "ДОННТУ", 2021. - 1 файл. - Систем. требования: Acrobat Reader. http://ed.donntu.ru/books/21/m7297.pdf

6. Методические указания к проведению практических занятий по дисциплине "Квантовая химия" [Электронный ресурс] : для обучающихся направления подготовки 18.03.01 "Химическая технология", всех форм обучения / ГОУ ВПО «ДОННТУ»,, Кафедра общей, физической и органической химии ; ГОУВПО "ДОННТУ", Каф. общ., физ. и орган. химии ; сост. Е. И. Волкова. - 4 Мб. - Донецк : ГОУВПО "ДОННТУ", 2021. - 1 файл. - Систем. требования: Acrobat Reader. http://ed.donntu.ru/books/21/m7298.pdf

ЭЛЕКТРОННО-ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

ЭБС ДОННТУ – http://donntu.ru/library.

ЭБС IPRbooks - http://www.iprbookshop.ru/

Дистанционный курс «Наноматериалы и нанотехнологии» - http://dist.donntu.ru

Internet-ресурсы

1. IPR Smart : автоматизир. библ. информ. система // Научная библиотеки Донецкого национального технического университета. – Донецк, 2003-2022. – Режим доступа : для зарегистирир. пользователей в локальной сети НБ ДОННТУ. – Текст : электронный.

2. Электронный каталог научной библиотеки Донецкого национального технического университета. – Донецк : НБ ДОННТУ, 1999-2022. – URL: http://ec.donntu.ru/. – Текст : электронный.

3. Информио : электрон. справочник / ООО «РИНФИЦ». – Москва : Издат. дом «Информио», [2018-2022]. – URL: https://www.informio.ru/. – Текст : электронный.

4. IPRsmart : весь контент ЭБС IPR BOOKS : цифровой образоват. ресурс / ООО «Ай Пи Эр Медиа». – [Саратов : Ай Пи Эр Медиа, 2022]. – URL: http://www.iprbookshop.ru. – Режим доступа : для авторизир. пользователей. – Текст. Аудио. Изображения : электронные.

5. Лань : электронно.-библ. система. – Санкт-Петербург : Лань, сор. 2011–2021. – URL: https://e.lanbook.com/. – Режим доступа : для авторизир. пользователей. – Текст : электронный.

6. СЭБ : Консорциум сетевых электрон. б-к / Электрон.-библ. система «Лань» при поддержке Агенства стратег. инициатив. – Санкт-Петербург : Лань, сор. 2011–2021. – URL: https://e.lanbook.com/. – Режим доступа : для пользователей организаций-участников, подписчиков ЭБС «Лань». – Текст : электронный.

7. Научно-информационный библиотечный центр имени академика Л. И. Абалкина : электронная библиотека / Рос. экон. ун-т им. акад. Г.В. Плеханова. – Москва : KnowledgeTree Inc., 2008. – URL: http://liber.rea.ru/login.php. – Режим доступа : для авторизир. пользователей. – Текст : электронный.

8. Book on lime : электрон. библ. система : дистанц. образование / Изд-во КДУ МГУ им. М.В. Ломоносова. – Москва : КДУ, сор. 2017. – URL: https://bookonlime.ru. – Текст. изображение. Устная речь : электронный.

9. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU : информ.-аналит. портал / ООО Научная электронная библиотека. – Москва : ООО Науч. электрон. б-ка, 2000–2022. – URL: https://elibrary.ru. – Режим доступа : для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

10. Национальная электронная библиотека : НЭБ : федер. гос. информ. система / М-во ryльтуры Рос. Федерации [и др.]. – Москва : Рос. гос. б-ка : ООО ЭЛАР, [2008–2022]. – URL: https://rusneb.ru/. – Текст. Изображение : электронный.

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Лекционный занятия:

Учебная аудитория № 7.118, учебный корпус 7, для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (мультимедийное оборудование: ноутбук (ОС - Windows 8.1 Professionalx86/64 (академическая подписка DreamSparkPremium), LibreOffice 3.3.0.4 (лицензия GNULGPLv3+ и MPL2.0), мультимедийный проектор, экран; специализированная мебель: доска аудиторная, столы аудиторные, стулья ученические; демонстрационные стенды и плакаты).

7.2. Практические занятия:

Учебная аудитория № 7.115, учебный корпус 7, для проведения практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (мультимедийное оборудование: ноутбук (ОС - Windows 8.1 Professionalx86/64 (академическая подписка DreamSparkPremium), LibreOffice3.3.0.4 (лицензия GNULGPLv3+ и MPL2.0), мультимедийный проектор, экран; специализированная мебель: доска аудиторная, столы аудиторные, стулья ученические; демонстрационные стенды и плакаты.

7.3. Самостоятельная работа:

Помещения для самостоятельной работы с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации: читальные залы, учебные корпуса 2, 3 (Компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду (ЭИОС ДОННТУ) и электронно-библиотечную систему (ЭБС IPRbooks), а также возможностью индивидуального неограниченного доступа обучающихся в ЭБС и ЭИОС посредством Wi-Fi с персональных мобильных устройств. ОС – MicrosoftWindows 7, OpenOffice 2.0.3 – общественная лицензия MPL 2.0, GrubloaderforALTLinux – лицензия GNULGPLv3, MozillaFirefox – лицензия MPL2.0, Moodle (ModularObject-OrientedDynamicLearningEnvironment) – лицензия GNUGPL).