

## **Название дисциплины: Квантовая механика (ФФФХИ)**

### **1. Цели и задачи освоения дисциплины:**

Цель: показать роль квантовой механики как теоретического фундамента современной квантовой химии, научить основам классической механики с единых позиций теоретической физики, основным положениям квантовой механики, включая работу с операторами, вычисление коммутаторов, вычисление угловых моментов, решение уравнения Шредингера для простейших случаев, пользоваться теорией возмущений Рэлея-Шредингера.

Задачи: Усвоение студентами основ классической механики с позиций теоретической физики как подготовительный этап для изучения основ квантовой механики. Усвоение студентами основ квантовой механики, являющейся фундаментом квантовой химии.

### **2. Место дисциплины в структуре ООП ВПО**

Дисциплина относится к Б-ХД Физических дисциплин

Структурный элемент ООП ВПО – МС (специалист МГУ), фундаментальная и прикладная химия

Дисциплина относится к базовой части учебного цикла БЗ

### **3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины:**

#### **(а) универсальных (ОК):**

умением логически верно, аргументированно и ясно строить устную и письменную речь, владением развитой письменной и устной коммуникацией, включая иноязычную культуру (ОК-6);

владением одним из иностранных языков (преимущественно английским) на уровне чтения научной литературы и навыков разговорной речи (ОК-7);

умением работать с компьютером на уровне пользователя и способностью применять навыки работы с компьютерами как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности (ОК-8);

способностью понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны (ОК-9);

владением основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, наличием навыков работы с компьютером, как средством управления информацией (ОК-10);

настойчивостью в достижении цели с учетом моральных и правовых норм и обязанностей; способностью к сотрудничеству, разрешению конфликтов, к толерантности (ОК-13);

способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения (ОК-14)

владением основными методами защиты производственного персонала и населения от возможных последствий аварий, катастроф и стихийных бедствий (ОК-21).

#### **(Б) профессиональных (ОК):**

пониманием сущности и социальной значимости профессии, основных перспектив и проблем, определяющих конкретную область деятельности (ПК-1);

пониманием роли естественных наук (химии в том числе) в выработке научного мировоззрения (ПК-2);

способностью использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук (ПК-3);

использованием основных законов естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применением методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ПК-4);

знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, наличием представлений о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК-5);

использованием основных законов естественнонаучных дисциплин, умением ориентироваться в создающихся условиях производственной деятельности и адаптироваться в новых условиях (ПК-6);

пониманием необходимости и способностью приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владением ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций (ПК-7);

пониманием проблем организации и управления деятельностью научных коллективов (ПК-8);

пониманием принципов работы и умением работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований (ПК-9);

владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований, свободным владением ими при проведении самостоятельных научных исследований (ПК-10);

знанием основ теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, химии биологических объектов, химической технологии) (ПК-11);

умением применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных (ПК-12);

владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций (ПК-13);

пониманием основных химических, физических и технических аспектов химического промышленного производства с учетом сырьевых и энергетических затрат (ПК-14);

владением методами регистрации и обработки результатов химических экспериментов (ПК-15);

пониманием необходимости безопасного обращения с химическими материалами с учетом их физических и химических свойств, способностью проводить оценку возможных рисков (ПК-16);

способностью на научной основе организовать свой труд, самостоятельно оценить результаты своей деятельности, владением навыками самостоятельной работы, в том числе в сфере проведения научных исследований (ПК-17);

умением анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме дипломной работы, способностью самостоятельно составлять план исследования (ПК-18);

способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения (ПК-19);

наличием опыта профессионального участия в научных дискуссиях, умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК-20);

способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения (ПК-21);

владением основами делового общения, наличием навыков межличностных отношений и способностью работать в научном коллективе (ПК-22);

владением базовыми понятиями экологической химии, способностью оценить экологические риски производств и применять принципы зеленой химии при разработке химических реакций и технологических производств (ПК-23);

в педагогической деятельности:

владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в школе (ПК-24);

владением базовыми навыками педагогической деятельности (ПК-25)

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

**Знать:** основные законы и уравнения классической и квантовой механики, схемы сложения угловых моментов, правила вычисления коммутаторов, теорию возмущений Рэлея-Шредингера, подходы к решению уравнения Шредингера для основных задач квантовой механики.

**Уметь:** решать уравнение Шредингера для основных задач квантовой механики типа движения свободной частицы, движения в потенциальном ящике, жесткого ротатора, гармонического осциллятора, атома водорода и водородоподобных атомов.

**Владеть:** простейшими расчетными методами решения задач квантовой механики, навыками поиска решений задач квантовой механики в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применения их при решении практических задач.

**Приобрести опыт деятельности:** в анализе различных физико-химических задач с позиций квантовой механики, применения полученных знаний к анализу спектроскопических и других экспериментальных результатов, формулировке и решении конкретных физико-химических задач, интересующих фундаментальную науку и практику.

#### 4. Содержание и структура дисциплины

4.1. Содержание разделов дисциплины (К – коллоквиум, Т – проверочная самостоятельная работа (тест), РК – рубежная контрольная работа, ДЗ – домашнее задание, РГЗ – расчетно-графическое задание)

№ раз-дела	Наименование раз-дела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	Введение	Введение в курс «Квантовая механика».	
	Классическая механика, как основа для изучения квантовой механики.	Классическая механика, ее основные понятия. Законы Ньютона. Принцип относительности Галилея, системы координат, задача о кинетической энергии двух масс. Вращение твердого тела. Центр инерции механической системы. Жесткий ротатор, моменты инерции, элементы теории групп. Принцип наименьшего действия. Функция Лагранжа. Уравнения Лагранжа. Канонические уравнения Гамильтона. Законы сохранения, интегралы движения. Законы сохранения энергии, импульса и момента импульса. Гармонический осциллятор (классическое решение).	К
2	Квантовая механика.	История ее появления. Понятие о корпускулярно-волновом дуализме, гипотеза Луи де Бройля, опыты Дэвиссона и Джермера. Статистическое толкование волн де Бройля. Понятие измерения по Н. Бору и роль прибора в квантовой механике. Принцип неопределенности В. Гейзенберга, его физический смысл. Принцип дополнителности Н. Бора. Волновая функция системы, ее физический смысл. Принцип суперпозиции. Операторы квантовой механики и их основные свойства. Сложение и умножение операторов. Понятие о коммутаторах. Уравнение Шредингера, зависящее от времени. Стационарные состояния и стационарное уравнение Шредингера. Момент импульса микрочастицы, коммутационные соотношения для его компонент и квадрата момента импульса. Спин электрона. Собственные значения квадрата оператора спина и их роль в определении качества волновых функций. Схемы сложения моментов Рассел – Саундерса и $j$ - $j$ связи. Квантовый осциллятор. Принципиальное отличие от классического гармонического осциллятора, энергия нулевых колебаний. Туннельный эффект, его парадоксальность. Частица в одномерном потенциальном ящике. Движение свободной частицы. Жесткий ротатор. Уравнение Шредингера для атома водорода. Теория возмущений Рэлея – Шредингера.	К

#### 4.2. Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1.50 зачетных единиц (54 часа), из них 0.50 – «квантовая механика» (18 часов), 0.50 - семинары по квантовой механике (18 часов), самостоятельная работа по квантовой механике – 0.50 (18 часов).

Вид работы	Семестр 5
<b>Общая трудоемкость</b>	<b>1.50 (54)</b>
<b>Аудиторная работа:</b>	<b>1.00 (36)</b>
Лекции (Л)	0.50 (18)
Практические занятия (ПЗ)	0.50 (18)
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>0.50 (18)</b>
<b>Вид итогового контроля</b>	экзамен

Разделы дисциплины по семестрам

№ раз-дела	Наименование раздела	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ		
1	Классическая механика	14	4	6		4
2	Квантовая механика	40	14	12		14
	Итого:	54	18	18		18

4.3. Практические занятия (семинары)

№ раз-дела	№ занятия	Тема	Кол-во часов
1	1	Принцип относительности Галилея, системы координат, задача о кинетической энергии двух масс.	2
	2	Первый закон Ньютона и функция Лагранжа, вывод второго закона Ньютона, вращение твердого тела.	2
	3	Жесткий ротатор, $I_{xx}$ для $H_2CO$ , волчка, моменты инерции для $CO_2$ , элементы теории групп.	2
2	4	Вычисление простейших коммутаторов.	2
	5	Вычисление коммутаторов момента импульса.	2
	6	Схемы сложения моментов в квантовой механике. Термы Рассел-Саундерса.	2
	7	Вычисление термов атомов лития, углерода.	2
	8	Вычисление термов атомов кислорода.	2
	9	Вычисление термов атомов титана.	2

4.4. Самостоятельное изучение разделов дисциплин

№ раз-дела	№ вопроса	Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов
1	1	Вопросы для подготовки к коллоквиуму № 1.	4
2	2	Вопросы к коллоквиуму № 2.	14

## 5. Образовательные технологии

5.1. Интерактивные образовательные технологии, используемые в аудиторных занятиях

Семестр	Вид занятия	Интерактивные образовательные технологии	Кол-во часов
	Лекции	мультимедийный проектор, презентация	10
Итого			10

## 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Контроль знаний состоит из двух этапов:

1. Индивидуальная беседа с каждым студентом по разделам всего теоретического курса во время двух коллоквиумов.
2. Регулярный опрос студентов во время семинарских занятий.

### Вопросы к коллоквиумам (семестр 5)

#### Раздел 1, коллоквиум № 1 «классическая механика».

Закон сохранения энергии в классической механике. Закон сохранения импульса в классической механике. Закон сохранения момента импульса в классической механике. Классический гармонический осциллятор. Определение механической системы. Определение понятия обобщенные координаты. Что называется числом степеней свободы и чему равно их количество. Что такое уравнения связи. Формулировка принципа наименьшего действия. Написать уравнения Лагранжа и сопоставить их с уравнениями Ньютона. Написать канонические уравнения Гамильтона и сопоставить их с уравнениями Лагранжа. Принцип относительности Галилея и преобразования Галилея. Написать формулу, определяющую центр инерции.

#### Раздел 2, коллоквиум № 2 «Квантовая механика».

Гипотеза и уравнение Луи де Бройля. Правильное толкование волн де Бройля и кто его автор. Принцип неопределенности Гейзенберга и его физический смысл. Принцип неопределенности Гейзенберга и его физический смысл. Принцип дополнительности Нильса Бора. Принцип суперпозиции. Два основных свойства операторов квантовой механики и их математическая запись. Определение суммы и произведения квантово-механических операторов. Какое условие должно выполняться для физических величин, чтобы можно было складывать и умножать соответствующие им операторы. Определение коммутатора и что означает равенство или неравенство его нулю. Вычислить коммутатор  $[x, p_x]$ . Вычислить коммутатор  $[x, p_y]$ . Временное уравнение Шредингера для одной и многих частиц. Определение стационарных состояний в квантовой механике, стационарное уравнение Шредингера. Принципиальное отличие классического и квантового осцилляторов. Волновая функция системы и ее физический смысл. Схемы Рассел – Саундерс и j-j-связи сложения орбитального и спинового моментов. Понятие спин в квантовой механике, собственные значения операторов  $S^2$  и  $S_z$ . Определение теории возмущений. Теория возмущений Рэлея-Шредингера, вывод поправки к энергии второго порядка.

### Вопросы для подготовки к экзамену (семестр 5):

1. Введение в курс «Квантовая механика».
2. Основные понятия классической механики.
3. Законы Ньютона. Принцип наименьшего действия. Функция Лагранжа.
4. Уравнения Лагранжа.
5. Канонические уравнения Гамильтона.

6. Принцип относительности Галилея.
7. Законы сохранения, интегралы движения.
8. Закон сохранения энергии.
9. Закон сохранения импульса.
10. Закон сохранения момента импульса.
11. Центр инерции механической системы.
12. Гармонический осциллятор (классическое решение).
13. История возникновения квантовой механики. Понятие о корпускулярно-волновом дуализме, гипотеза Луи де Бройля.
14. Опыты Дэвиссона и Джермера. Статистическое толкование волн де Бройля.
15. Понятие измерения по Н. Бору и роль прибора в квантовой механике.
16. Принцип неопределенности В. Гейзенберга, его физический смысл.
17. Принцип дополнительности Н. Бора.
18. Волновая функция системы, ее физический смысл. Принцип суперпозиции.
19. Операторы квантовой механики и их основные свойства. Сложение и умножение операторов.
20. Понятие о коммутаторах.
21. Уравнение Шредингера, зависящее от времени.
22. Стационарные состояния и стационарное уравнение Шредингера.
23. Момент импульса микрочастицы. Коммутационные соотношения для его компонент и квадрата момента импульса.
24. Спин электрона. Собственные значения квадрата оператора спина и их роль в определении качества волновых функций.
25. Схемы сложения моментов Рассел–Саундерса и по схеме  $j-j$  связи.
26. Квантовый осциллятор. Принципиальное отличие от классического гармонического осциллятора, энергия нулевых колебаний.
27. Туннельный эффект, его парадоксальность.
28. Частица в одномерном потенциальном ящике.
29. Движение свободной частицы. Жесткий ротатор.
30. Уравнение Шредингера для атома водорода и водородоподобных атомов.
31. Принцип Паули.
32. Теория возмущений Рэлея-Шредингера.

## **7. Учебно-методическое обеспечение дисциплины**

### 7.1. Основная литература (к семестру 5)

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика в десяти томах. Том 1. Механика. – М.: Наука, 1988. – 216 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика в десяти томах. Том III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М., Наука, 1974. – 752 с.
3. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. – М.: Наука, 1976. – 664 с.
4. Боженко К.В. Основы квантовой химии. Конспект лекций. – М.: Изд-во РУДН, 2010. – 124 с.
5. Боженко К.В. Основы квантовой химии. Конспект лекций, часть 2. – М.: Изд-во РУДН, 2012. – 67 с.
5. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. – М.: Мир; Изд-во МГУ, 2001. – 519 с.

### 7.2. Дополнительная литература (к семестру 5)

1. Боженко К.В. Методические указания по изучению курса «Основы квантовой химии». Раздел I: Классическая механика. – М.: Изд-во РУДН, 2005. – 23 с.
2. Боженко К.В. Методические указания по изучению курса «Основы квантовой химии». Раздел II: Квантовая механика. – М.: Изд-во РУДН, 2005. – 24 с.

7.3. Периодические издания.

7.4. Интернет-ресурсы

ИВТАНТЕРМО <http://www.ihed.ras.ru>, <http://www.chem.msu.ru/rus/handbook/ivtan/> .  
NIST <http://www.nist.gov>

7.5. Лекционный материал курса «квантовая механика» расположен на сайте

конспект лекций ч.1 - [http://web-local.rudn.ru/web-local/prep/rj/files.php?f=pf\\_401fa91ac70e50aeb2df07ee29f7814e](http://web-local.rudn.ru/web-local/prep/rj/files.php?f=pf_401fa91ac70e50aeb2df07ee29f7814e)

конспект лекций ч.2 - [http://web-local.rudn.ru/web-local/prep/rj/files.php?f=pf\\_568a1c12d5003f5b26f73965ea27ab57](http://web-local.rudn.ru/web-local/prep/rj/files.php?f=pf_568a1c12d5003f5b26f73965ea27ab57)

7.6. Методические указания по изучению курса «квантовая механика» расположены на сайте

методические указания Ч.1 - [http://web-local.rudn.ru/web-local/prep/rj/files.php?f=pdf\\_394\\_606](http://web-local.rudn.ru/web-local/prep/rj/files.php?f=pdf_394_606)

методические указания ч.II - [http://web-local.rudn.ru/web-local/prep/rj/files.php?f=pdf\\_395\\_607](http://web-local.rudn.ru/web-local/prep/rj/files.php?f=pdf_395_607)

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Лекционные занятия и семинары проводятся в специально оборудованной аудитории с мультимедийным проектором (компьютерный класс корпуса общего назначения ИПХФ РАН), каждый учащийся имеет индивидуальное рабочее место и отдельные задания.