

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ  
Государственное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
Химический факультет  
Кафедра неорганической химии

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по учебной работе  
\_\_\_\_\_ В.П. Гарькин  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2006 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

“ **КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ** ”

(блок «Общепрофессиональные дисциплины»; раздел «Федеральный компонент»;  
основная образовательная программа специальности 020101 Химия)

Самара  
2006

Рабочая программа составлена на основании Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования специальности 020101 Химия, утвержденного 10.03.2000 г. (номер государственной регистрации 127 ЕН/СП) и типовой (примерной) программы дисциплины «КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ», одобренной 29.04.2002 Советом по химии УМО по классическому университетскому образованию.

Составитель рабочей программы: Блатов В.А., профессор, д.х.н.

Рецензент: Шевченко А.П., доцент, к.х.н.

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры неорганической химии (протокол № 1 от 30 августа 2006 г.)

Заведующий кафедрой

30 августа 2006 г. \_\_\_\_\_ Сержкин В.Н

#### СОГЛАСОВАНО

Декан

« 29 » 09 \_\_\_\_\_ 2006 г.

С.В. Курбатова

Начальник

методического отдела

« 29 » 09 \_\_\_\_\_ 2006 г.

Н.В. Соловова

#### ОДОБРЕНО

Председатель методической  
комиссии факультета,

доц., к.х.н.

« 28 » 09 \_\_\_\_\_ 2006 г.

И.В. Лобачева

## 1. Цели и задачи дисциплины, её место в учебном процессе, требования к уровню освоения содержания дисциплины

### 1.1. Цели и задачи изучения дисциплины

**Цель дисциплины** - изучение студентами основ квантовой механики в приложении к решению химических задач, а также теоретических и расчетных методов квантовой химии. Основное внимание уделяется не математическому аппарату, а расшифровке физического смысла понятий квантовой механики и квантовой химии и практическому овладению расчетными методами квантовой химии.

**Задачи дисциплины:** научить студентов основам квантовой механики в приложении к решению химических задач, а также помочь им овладеть теоретическими и расчетными методами квантовой химии.

### 1.2. Требования к уровню подготовки студента, завершившего изучение данной дисциплины

Студенты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

- **Иметь представление:** о физическом смысле и взаимосвязи основных законов, правил, постулатов и понятий квантовой механики и квантовой химии.
- **Знать:** особенности современных расчетных методов квантовой химии.
- **Уметь:** пользоваться специфической терминологией квантовой механики и корректно выбрать метод для расчета конкретной химической системы.

### 1.3.Связь с предшествующими дисциплинами

Неорганическая химия - в части теории строения атома и молекул, химических свойств элементов, основ общей химии.

Физика - разделы "Механика", "Молекулярная физика", "Строение атома".

Высшая математика - разделы "Производная", "Интеграл", "Теория функций комплексного переменного", "Дифференциальные уравнения".

### 1.4.Связь с последующими дисциплинами

Физическая химия, Органическая химия, Строение вещества - как основа теории строения атома и молекул, а также как теоретическая основа расчетных методов.

Компьютерная химия - как теоретическая основа расчетных методов.

Численные методы и программирование - как один из основных разделов химии, в котором применяются численные методы.

## 2. Содержание дисциплины

### 2.1. Объем дисциплины и виды учебной работы (в часах)

Очная форма обучения (4 семестр – экзамен)

Вид учебных занятий	Количество часов
<i>Всего часов аудиторных занятий</i>	90
Лекции	60
Практические занятия (семинары)	30
<i>Всего часов самостоятельной работы</i>	50
Подготовка к практическим занятиям	20
Подготовка к экзамену	30
<i>Всего часов по дисциплине</i>	140

## 2.2. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Название раздела дисциплины	Количество часов	
		Лекции	Семинары
1	Предмет квантовой механики и квантовой химии. Математический аппарат квантовой механики.	4	2
2	Вероятностная трактовка квантовой механики. Стационарное уравнение Шредингера.	4	2
3	Квантово-механическая задача о жестком ротаторе. Атом водорода, вид волновой функции.	4	2
4	Одноэлектронное приближение. Орбитали слейтеровского и гауссова типа.	2	2
5	Вариационный принцип, теория возмущений.	2	1
6	Угловые моменты в многоэлектронных атомах.	4	2
7	Принцип Паули.	2	1
8	Метод ССП Хартри-Фока в приближении КВ.	4	2
9	Молекулярное уравнение Шредингера и общая классификация подходов к его решению.	2	1
10	Молекулярный ион водорода, решение вариационной задачи.	4	2
11	Молекула водорода. Решение задачи методами МО и ВС.	4	2
12	Неэмпирические (ab initio) методы в квантовой химии. Уравнения Рутаана.	4	2
13	Анализ заселенностей АО и порядков связей по Малликену.	2	1
14	Полуэмпирические методы ССП ХФР. Основные приближения полуэмпирических методов. Метод CNDO. Метод INDO, расчет возбужденных состояний молекул.	4	2
15	Методы MINDO, их модификации. Методы MNDO, AM1 и PM3.	4	2
16	$\pi$ -Электронное приближение. Простой метод Хюккеля (MOX).	4	2
17	Индексы реакционной способности молекул.	2	1
18	Расширенный метод Хюккеля, области его применения.	2	1
19	Возможности применения и сравнительный анализ различных полуэмпирических методов.	2	1

## 2.3. Лекционный курс

**ВВЕДЕНИЕ.** Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной химической науки. Перспективы ее развития и применения при решении химических задач.

**ТЕМА 1. ОСНОВНЫЕ ПОСТУЛАТЫ, МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ ЗАДАЧИ.** Математический аппарат квантовой механики. Основные постулаты квантовой механики. Волновые функции, их основные свойства. Операторы, собственные функции и собственные значения. Волновая механика Шредингера и матричная механика Гейзенберга. Соотношение неопределенностей. Обозначение интегралов по Дираку. Операторы координат, импульсов, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона.

Принцип суперпозиции состояний. Вероятностная трактовка квантовой механики. Полная ортонормированная система волновых функций.

Стационарное уравнение Шредингера, его аналогия с уравнениями классической механики. Зависящее от времени уравнение Шредингера.

Решение уравнения Шредингера для задачи о движении свободной частицы и задачи о движении частицы в потенциальном ящике.

Квантово-механическая задача о жестком ротаторе. Волновая функция и энергия жесткого ротатора. Сферические гармоники, угловая зависимость волновых функций.

Атом водорода, вид волновой функции. Физический смысл квантовых чисел. Зависимость радиальной составляющей волновой функции от расстояния между ядром и электроном при различных квантовых числах. Атомная система единиц.

## **ТЕМА 2. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ ЗАДАЧ.**

Многоэлектронные атомы. Трудности решения квантово-механической задачи для системы многих электронов. Одноэлектронное приближение. Орбитали слейтеровского и гауссова типа. Правила Слейтера для вычисления констант экранирования. Основные базисные наборы АО: минимальный, дабл-дзета, поляризационный, дополненный диффузными функциями. Приближение независимых электронов. Приближение самосогласованного поля (ССП).

Вариационный принцип, решение вариационной задачи для атома гелия в базисе слейтеровских функций.

Теория возмущений, приближение нулевого и первого порядка. Энергия атома гелия в рамках теории возмущений.

Угловые моменты в многоэлектронных атомах (орбитальный, спиновый, полный). Приближение Рассела-Саундерса и правило Клечковского. Атомные термы в нулевом и первом приближении схемы Рассела-Саундерса. Правила Хунда. Приближение  $jj$ -связи.

Принцип Паули. Принцип тождественности микрочастиц. Симметричные и антисимметричные волновые функции. Фермионы и бозоны.

Метод конфигурационного взаимодействия (КВ), использование принципа Паули при построении волновых функций в методе КВ.

Математическая формулировка одноэлектронного приближения. Метод СПП Хартри-Фока в приближении КВ. Операторы Фока, кулоновский, обменный, их собственные значения. Теорема Купманса.

**ТЕМА 3. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ ХИМИИ.** Молекулярное уравнение Шредингера и общая классификация подходов к его решению. Приближение МО ЛКАО. Пренебрежение неэлектростатическим взаимодействием. Приближение Борна-Оппенгеймера и адиабатическое приближение. Понятие о вибронных взаимодействиях.

Молекулярный ион водорода, решение вариационной задачи. Секулярное (вековое) уравнение. Связывающие и разрыхляющие орбитали. Теорема Гельмана-Фейнмана.

Молекула водорода. Решение задачи методами МО и ВС (Гайтлера-Лондона). Метод ВС Полинга-Слейтера, концепции гибридизации и резонанса в терминах квантовой механики.

Гомоядерные двухатомные молекулы, вычисление энергии их МО с помощью вариационного принципа. Молекулярные квантовые числа.

**ТЕМА 4. НЕЭМПИРИЧЕСКИЕ, ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЕ И ЭМПИРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ. КАЧЕСТВЕННАЯ ТЕОРИЯ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ.** Неэмпирические (*ab initio*) методы в квантовой химии. Уравнения Рутаана. Одно- и многоконфигурационный метод СПП Хартри-Фока-Рутаана (ССП ХФР). Ограниченный и неограниченный метод СПП

ХФР. Метод полуэлектрона. Основные этапы решения задачи в методах ab initio. Комплекс программ неэмпирических расчетов GAUSSIAN. Составление задания для расчетов простейших молекул. Проблема выбора базиса АО. Оптимизация геометрии. Анализ заселенностей АО и порядков связей по Малликену. Преимущества и недостатки неэмпирических методов.

Полуэмпирические методы ССП ХФР. Основные приближения полуэмпирических методов. Приближения валентных электронов, нулевого дифференциального перекрывания, расчет одно- и двухэлектронных интегралов. Метод CNDO. Метод INDO, расчет возбужденных состояний молекул. Методы MINDO, их модификации. Метод MNDO, приближение нулевого двухатомного дифференциального перекрывания. Методы AM1 и PM3. Возможности применения и сравнительный анализ различных полуэмпирических методов. Расчет физических характеристик молекул с помощью методов ab initio и полуэмпирических методов.

$\pi$ -Электронное приближение. Основные различия между эмпирическими и полуэмпирическими расчетными методами. Простой метод Хюккеля (MOX) и применение его для расчета  $\pi$ -электронных систем (этилен, бутadiен, акролеин, формальдегид, триметиленметан). Индексы реакционной способности молекул. Расчет циклических полиенов  $C_nH_n$  в MOX. Критика MOX. Расширенный метод Хюккеля, области его применения.

## 2.4. Практические(семинарские) занятия

См. табл. раздела 2.2.

## 3. Организация текущего и промежуточного контроля знаний

### 3.1. Контрольные работы

Тематика контрольных работ	Сроки проведения	Разделы и темы дисциплины
1. Основные постулаты и математический аппарат квантовой механики. Задачи о жестком ротаторе и атоме водорода	6-7 учебная неделя	Тема 1
2. Теория многоэлектронного атома	10-11 учебная неделя	Тема 2
3. Основные положения квантовой химии	14-15 учебная неделя	Тема 3
4. Неэмпирические, полуэмпирические и эмпирические методы квантовой химии	17 учебная неделя	Тема 4

### 3.2. Поддержка самостоятельной работы

1. В.А.Блатов. Неэмпирические расчетные методы квантовой химии. Самара:СамГУ, 1996.
2. В.А.Блатов, А.П.Шевченко. Методы компьютерной химии и комплекс программ HYPERCHEM. Самара:СамГУ, 1999.

Итоговый контроль проводится в виде экзамена на основании программы лекционного курса.

**4. Технические средства обучения и контроля, использование ЭВМ** (Перечень обучающих, контролирующих и расчетных программ, диафильмов, слайдфильмов, кино- и телефильмов).

- Комплекс программ компьютерной химии HYPERCHEM.

**5. Активные методы обучения (деловые игры, научные проекты)**

Не используются.

**6. Материальное обеспечение дисциплины** (*Современные приборы, установки (стенды), необходимость специализированных лабораторий и классов*).

Компьютерные классы, оснащенные ПЭВМ.

## **7. Литература**

**7.1. Основная** (*одновременно изучают дисциплину 75 человек*).

1. Л.А.Грибов, С.П.Муштакова. Квантовая химия. М.:Гардарики, 1999. (*Рекомендован Министерством общего и профессионального образования РФ; 20 экземпляров*)
2. В.А.Блатов, А.П.Шевченко, Е.В.Пересыпкина. Полуэмпирические расчетные методы квантовой химии. Самара:Универс-групп, 2005. (*гриф УМО по химии*).

**7.2. Дополнительная**

1. Н.Ф.Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. М.:Мир, 2001.
2. Р.Фларри. Квантовая химия. Введение. М.:Мир, 1985.
3. Т.Кларк. Компьютерная химия. М.:Мир, 1990.
4. Р.Заградник, Р.Полак. Основы квантовой химии. М.:Мир, 1979.
5. Дж.Маррел, С.Кеттл, Дж.Теддер. Химическая связь. М.:Мир, 1980.

**7.3. Учебно-методические материалы по дисциплине**

3. В.А.Блатов. Неэмпирические расчетные методы квантовой химии. Самара:СамГУ, 1996.
4. В.А.Блатов, А.П.Шевченко. Методы компьютерной химии и комплекс программ HYPERCHEM. Самара:СамГУ, 1999.