

Дисциплина «**Основы квантовой механики**» относится к базовой части блока химических дисциплин, является обязательной. Курс предназначен для подготовки химиков по специальностям общего профиля как основа для усвоения студентами основных курсов «Квантовая химия» и «Строение молекул». Место курса в системе общего образования химиков-специалистов определяется тем, что фундаментальные идеи и методы квантовой механики, наряду с представлениями статистической физики и феноменологическими подходами составляют сегодня основу теоретических представлений и расчетных методов современной химии. Развиваемые навыки и представления закрепляются идущими параллельно этому курсу семинарскими занятиями по решению простейших квантовомеханических задач.

Курс читается в 4-м семестре 2-го курса.

Цели и задачи освоения дисциплины.

Цель курса состоит в освоении основных представлений современного фундамента теоретической химии, используемых во всех разделах химической науки.

Основные задачи преподавания курса сводятся к

1. Демонстрации и освоении базовых положений, на основе которых развиваются представления и создаются модели современной химии.
2. Развитию у студентов понимания особенностей квантовомеханических представлений, их взаимосвязи с представлениями других разделов теоретической физики и теоретической химии.
3. Формированию навыков использования качественных и количественных методов квантовой механики при рассмотрении простейших атомных и молекулярных задач.

Требования к результатам освоения содержания дисциплины

В результате освоения дисциплины студент должен

Знать: современные способы аналитического описания структурных характеристик и энергетических свойств молекулярных систем, возможности описания колебательных и вращательных состояний молекул на примере модельных систем (гармонический осциллятор, жесткий ротатор и др.), ограничения используемых современных моделей строения молекул.

Уметь:
решать простейшие квантово-механические задачи.

Владеть:
навыками поиска недостающей информации и ее анализа, существующими стандартными методами расчетными методами, используемыми при решении квантово-механических задач.

Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 180 часов, из них 18 ч. – лекции, 36 ч. – семинары и 126 ч. - самостоятельная работа.

Вид работы	Всего
Общая трудоёмкость, акад. часов	180
Аудиторная работа:	54
Лекции, акад. часов	18
Семинары, акад. часов	36

Лабораторные работы, акад. часов	
Самостоятельная работа, акад. часов	126
Вид итогового контроля (зачёт, зачёт с оценкой, экзамен)	экзамен

Лекции

№	Наименование раздела	Содержание
1	Постулаты и основы математического аппарата квантовой механики	Предмет квантовой механики. Основные этапы развития квантовой теории. Связь с представлениями классической механики. Главные тенденции в развитии квантовомеханических представлений применительно к формированию теоретических представлений современной химии. Основные постулаты квантовой механики. Квантовые состояния и волновые функции. Основные требования к волновым функциям. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве и нормировка волновых функций
2		Эволюция состояний и временное уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера. Дискретный и непрерывный спектры. Уравнение непрерывности. Системы с непрерывным энергетическим спектром. Нормировка волновых функций
3		Задача об атоме водорода. Разделение переменных. Дискретный спектр. Качественный характер радиальной и угловой частей волновой функции. <i>s</i> -, <i>p</i> - и <i>d</i> -функции. Вырождение электронных состояний как следствие симметрии центрального поля.
4	Приближённые методы квантовой механики	Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод. Метод Ритца. Теория возмущений Релея – Шрёдингера для дискретного спектра в отсутствие и при наличии вырождения. Временная теория возмущений
5	Заряженные частицы в электромагнитном поле	Заряженная частица в однородном электрическом и магнитном полях. Дипольный электрический и магнитный моменты системы частиц. Эффекты Штарка и Зеемана. Квантовая система в электромагнитном поле. Спонтанные и вынужденные переходы. Комбинационное рассеяние излучения. Коэффициенты Эйнштейна
6		Эволюция волнового пакета. Основные представления квантовой динамики. Спин и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения для них. Сложение спинов. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления
7	Системы тождественных частиц	Перестановочная симметрия волновых функций системы тождественных частиц. Бозоны и фермионы. Антисимметричность волновой функции системы электронов. Представление волновой функции в виде определителя
8	Теория рассеяния	Общая теория рассеяния. Теория упругих и неупругих столкновений. Понятие о релятивистской квантовой механике. Волновые уравнения Клейна – Гордона и Дирака

Семинары (практические занятия)

№	Наименование раздела	Содержание
1-2	Постулаты и основы математического аппарата квантовой механики	Операторы физических величин (наблюдаемых) в квантовой механике, средние значения и дисперсии наблюдаемых. Линейные, эрмитовы (симметричные) и унитарные (ортогональные) операторы. Собственные функции и собственные значения операторов. Матричное представление операторов
3		Операторы координат, импульсов, момента импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Коммутационные соотношения для операторов. Соотношения неопределенностей
4-7	Простейшие примеры применений квантовой механики	Простейшие примеры применения квантовой механики. Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций. Задачи о прямоугольном потенциальном ящике, потенциальном барьере и гармоническом осцилляторе
8		Контрольная работа (промежуточная)
9-10		Теория момента импульса (углового момента) Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса. Собственные значения операторов квадрата и одной из проекций момента импульса
11		Простейшие случаи матричного представления операторов углового момента. Правила сложения моментов импульса. Жесткий ротатор
12		Задача об атоме водорода.
13	Заряженные частицы в электромагнитном поле	Заряженная частица в однородном электрическом и магнитном полях. Дипольный электрический и магнитный моменты системы частиц. Эффекты Штарка и Зеемана.
14		Квантовая система в электромагнитном поле. Спонтанные и вынужденные переходы. Комбинационное рассеяние излучения. Коэффициенты Эйнштейна
15	Системы тождественных частиц	Бозоны и фермионы. Антисимметричность волновой функции системы электронов.
16		Контрольная работа (рубежная)

Примеры вопросов и заданий промежуточного и рубежного контроля

1. Постулаты квантовой механики.
Задание: найти коммутационное соотношение для пар операторов.
2. Математический аппарат квантовой механики.
Задание: выписать оператор Гамильтона для заданного атома.
3. Теория момента количества движения в квантовой механике.
Задание: выписать оператор Гамильтона для заданной двухатомной молекулы.
4. Матричное представление операторов. Спин и матрицы Паули

Задание: привести простейшие примеры использования теории возмущений (в матричном представлении).

Основная литература

В. В. Балашов, В. К. Долинов Курс квантовой механики, 2-е изд., Ижевск. 2001

А. Боум Квантовая механика: основы и приложения, «Мир», 1990

Л. А. Головань, Е. А. Константинова, П. А. Форш Задачи по квантовой механике для химиков. М.: Физ. Ф-т МГУ. 2010

П. В. Елютин, В. Д. Кривченков Квантовая механика с задачами. Физматлит. 2001

К. А. Казаков. Введение в теоретическую и квантовую механику. Изд-во МГУ, физ. Ф-т. 2008

Н. В. Карлов, Н. А. Кириченко Начальные главы квантовой механики М.: Физматлит. 2004. 360 с.

Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц Квантовая механика Нерелятивистская теория (Теоретическая физика. Т. 3) Переиздания последних лет.

Н. Ф. Степанов Квантовая механика и квантовая химия. М.: «Мир». 2001. 519 с.

Дополнительная литература.

А. Ярив Введение в теорию и приложения квантовой механики. М.: «Мир». 1984