

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт физики



**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор  
по образовательной деятельности КФУ  
Проф. Минзарипов Р.Г.

\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Программа дисциплины**

Квантовая механика атомов и молекул М2.В.2.1

Направление подготовки: 050100.68 - Педагогическое образование

Профиль подготовки: Образование в области физики

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Ситдигов А.С.

**Рецензент(ы):**

Мокшин А.В. , Сафаров Р.Х.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Мокшин А. В.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No

Казань  
2013

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) Ситдииков А.С.

### 1. Цели освоения дисциплины

Цель преподавания дисциплины "Квантовая механика атомов и молекул" - дать представление об основных положениях квантовой теории атомов и молекул, применении их для объяснения широкого круга физических явлений, научить студентов решать практические задачи а также прививать общекультурные и профессиональные навыки. Курс состоит из лекционных и практических занятий и сопровождается индивидуальной работой преподавателя со студентами при сдаче семестрового домашнего задания.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М2.В.2 Профессиональный" основной образовательной программы 050100.68 Педагогическое образование и относится к вариативной части. Осваивается на 1 курсе, 1, 2 семестры.

Квантовая механика атомов и молекул является одним из фундаментальных разделов квантовой механики и занимает одно из существенных мест в системе подготовки учителя физики. Студент, завершивший изучение дисциплины "Квантовая механика атомов и молекул" должен:

- понимать структуру квантовой механики атомов и молекул в целом и место этого раздела как в квантовой механике, так и в теоретической физике;
- знать наиболее общие понятия, принципы и законы квантовой механики атомов и молекул и область их применения;
- уметь применять эти принципы и законы при анализе конкретных физических процессов и явлений;
- уметь проецировать приобретенные знания на школьный курс физики.

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	Знать: общие положения физики, базовые концепции и понятия Уметь: использовать стандартные алгоритмы и естественно-научные методы Владеть: базовым математическим аппаратом
ОК-2 (общекультурные компетенции)	Знать: актуальные задачи физики и методики преподавания физики Уметь: использовать знания современных проблем физики и физического образования в решении профессиональных и образовательных задач Владеть: системой современных естественно-научных знаний
ОК-4 (общекультурные компетенции)	Знать: общие понятия о ресурсно-информационных базах для решения профессиональных задач, связанных как с научными исследованиями в области физики, так и в области методики преподавания физики Уметь: формировать ресурсно-информационные базы для решения профессиональных задач Владеть: соответствующим понятийным, физико-математическим аппаратом

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-5 (общекультурные компетенции)	Знать: основные концепции, связанные с информационными технологиями в области физико-математического образования Уметь: использовать информационные технологии, а также новые знания и умения в областях, не связанных со сферой физических исследований и физико-математического образования Владеть: способностью самостоятельно приобретать с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения
ПК-1 (профессиональные компетенции)	Знать: современные методики и технологии организации и реализации образовательного процесса на различных образовательных ступенях в образовательных учреждениях Уметь: практически применять методы и технологии современного физико-математического образования Владеть: навыками тестирования, апробации и использования методов и технологий физико-математического образования в различных образовательных учреждениях
ПК-16 (профессиональные компетенции)	Знать: основные положения и содержание современных образовательных технологий и методик обучения Уметь: проектировать новое учебное содержание, технологии и конкретные методики обучения Владеть: методами проектирования современных учебных программ и конкретных методик обучения
ПК-2 (профессиональные компетенции)	Знать: общие понятия, алгоритмы и методы диагностики и оценивания качества образовательного процесса Уметь: осуществлять мониторинг качества образовательного процесса Владеть: методами анкетирования, тестирования, оценки знаний, умений и навыков студентов
ПК-3 (профессиональные компетенции)	Знать: основные задачи инновационной образовательной политики Уметь: формировать образовательную среду и использовать свои способности в реализации задач инновационной образовательной политики Владеть: способностями в реализации задач инновационной образовательной политики в области физико-математического образования
ПК-4 (профессиональные компетенции)	Знать: методы, концепции и подходы организации исследовательской работы обучающихся Уметь: ставить актуальные исследовательские задачи и выполнять соответствующий контроль Владеть: навыками руководства исследовательской работой обучающихся
ПК-5 (профессиональные компетенции)	Знать: методы анализа теоретических и экспериментальных результатов научных физико-математических исследований Уметь: анализировать результаты научных исследований и применять их в дальнейшей научно-исследовательской работе Владеть: общими подходами анализа научно-исследовательских результатов
ПК-6 (профессиональные компетенции)	Знать: типовые решения физико-математических задач Уметь: предлагать собственные оригинальные решения исследовательских задач; критически подходить к их оценке Владеть: способностями к нетиповому, оригинальному решению исследовательских задач

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-7 (профессиональные компетенции)	Знать: современные методы физико-математических исследований Уметь: самостоятельно осуществлять научное исследование с использованием современных методов науки Владеть: базовыми и общими навыками выполнения самостоятельного научного теоретического и экспериментального исследования
ПК-8 (профессиональные компетенции)	Знать: подходы в разработке и реализации образовательных моделей, методик, технологий и приемов к анализу результатов процесса Уметь: разрабатывать, использовать и предлагать оригинальные методики и подходы в обучении Владеть: методами формирования и реализации образовательных технологий

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

.

2. должен уметь:

.

3. должен владеть:

.

.

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины отсутствует в 1 семестре; экзамен во 2 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Установочная лекция. Введение.	1	1	2	7	0	письменная работа
2.	Тема 2. Строение атомов и спин электрона.	1	2	2	7	0	письменная работа

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
3.	Тема 3. Многоэлектронные атомы и молекулы.	2	1	2	7	0	устный опрос
4.	Тема 4. Двухатомные и многоатомные молекулы.	2	2	2	7	0	устный опрос
5.	Тема 5. Зачет.	2	3	0	0	0	отчет
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	экзамен
	Итого			8	28	0	

## 4.2 Содержание дисциплины

### Тема 1. Установочная лекция. Введение.

#### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Введение. Математический аппарат квантовой механики. Линейные операторы и действия над ними. Собственные значения и собственные функции линейных операторов. Самосопряженные (эрмитовы) операторы. Свойство ортогональности собственных функций эрмитовых операторов. Случай вырождения. Разложение по ортогональным функциям. Системы тождественных частиц. Принцип тождественности частиц. Симметричные и антисимметричные волновые функции. Бозоны и фермионы, принцип Паули для фермионов. Связь спина со статистикой. Обменное взаимодействие.

#### **практическое занятие (7 часа(ов)):**

Введение. Математический аппарат квантовой механики. Линейные операторы и действия над ними. Собственные значения и собственные функции линейных операторов. Самосопряженные (эрмитовы) операторы. Свойство ортогональности собственных функций эрмитовых операторов. Случай вырождения. Разложение по ортогональным функциям. Системы тождественных частиц. Принцип тождественности частиц. Симметричные и антисимметричные волновые функции. Бозоны и фермионы, принцип Паули для фермионов. Связь спина со статистикой. Обменное взаимодействие.

### Тема 2. Строение атомов и спин электрона.

#### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Общие свойства движения в центрально-симметричном поле, законы сохранения. Радиальное уравнение Шредингера. Водородоподобный атом, его энергетический спектр. Стационарные состояния атома водорода и их классификация с помощью квантовых чисел. Волновые функции электрона в атоме водорода. Атомы щелочных металлов. Опыт Штерна и Герлаха. Волновая функция электрона с учетом спина. Орбитальный, спиновый и полный момент электрона. Понятие о спин-орбитальном взаимодействии.

#### **практическое занятие (7 часа(ов)):**

Общие свойства движения в центрально-симметричном поле, законы сохранения. Радиальное уравнение Шредингера. Водородоподобный атом, его энергетический спектр. Стационарные состояния атома водорода и их классификация с помощью квантовых чисел. Волновые функции электрона в атоме водорода. Атомы щелочных металлов. Опыт Штерна и Герлаха. Волновая функция электрона с учетом спина. Орбитальный, спиновый и полный момент электрона. Понятие о спин-орбитальном взаимодействии.

### Тема 3. Многоэлектронные атомы и молекулы.

#### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Атом гелия. Приближенные методы квантовой механики. Стационарная теория возмущений. Мультиплетность состояний. Обменная энергия. Ортогелий и парагелий. Понятие о методе самосогласованного поля. Классификация состояний электронов в атоме. Периодическая система элементов. Молекула водорода. Природа химической связи. Атом во внешнем поле (эффект Зеемана и магнитный момент атома).

**практическое занятие (7 часа(ов)):**

Атом гелия. Приближенные методы квантовой механики. Стационарная теория возмущений. Мультиплетность состояний. Обменная энергия. Ортогелий и парагелий. Понятие о методе самосогласованного поля. Классификация состояний электронов в атоме. Периодическая система элементов. Молекула водорода. Природа химической связи. Атом во внешнем поле (эффект Зеемана и магнитный момент атома).

**Тема 4. Двухатомные и многоатомные молекулы.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Атом гелия. Приближенные методы квантовой механики. Стационарная теория возмущений. Мультиплетность состояний. Обменная энергия. Ортогелий и парагелий. Понятие о методе самосогласованного поля. Классификация состояний электронов в атоме. Периодическая система элементов. Молекула водорода. Природа химической связи. Атом во внешнем поле (эффект Зеемана и магнитный момент атома).

**практическое занятие (7 часа(ов)):**

Электронные термы двухатомной молекулы. Колебательная и вращательная структуры двухатомной молекулы. Преддиссоциация. Симметрия молекулярных термов. Элементарные понятия из теории групп. Классификация термов многоатомных молекул и молекулярных колебаний. Колебательные уровни энергии.

**Тема 5. Зачет.**

**4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Установочная лекция. Введение.	1	1	подготовка к письменной работе	8	письменная работа
2.	Тема 2. Строение атомов и спин электрона.	1	2	подготовка к письменной работе	4	письменная работа
				подготовка к устному опросу	4	устный опрос
3.	Тема 3. Многоэлектронные атомы и молекулы.	2	1	подготовка к устному опросу	8	устный опрос
4.	Тема 4. Двухатомные и многоатомные молекулы.	2	2	подготовка к устному опросу	8	устный опрос
5.	Тема 5. Зачет.	2	3	подготовка к отчету	4	отчет
	Итого				36	

**5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения**

Применяемые образовательные методы и формы проведения занятий:

Проведение лекций в виде компьютерных презентаций и обсуждение материала по теме.  
Проведение контрольных работ и выполнение заданий по курсу.

Лекционные и практические занятия построены с применением компьютерной презентации, решения задач с привлечением данных реальных экспериментов. В часы практических занятий проводятся контрольные работы и опросы, что дает возможность оценить усваиваемость материала студентами и при необходимости подробно остановиться на проблемных вопросах.

## **6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

### **Тема 1. Установочная лекция. Введение.**

письменная работа , примерные вопросы:

Письменная работа, включающая решение простейших задач квантовой механики.

### **Тема 2. Строение атомов и спин электрона.**

письменная работа , примерные вопросы:

Контрольная работа с задачами на тему "Квантовомеханические операторы. Оператор спина".

устный опрос , примерные вопросы:

Опрос на знания фундаментальных определений раздела.

### **Тема 3. Многоэлектронные атомы и молекулы.**

устный опрос , примерные вопросы:

Опрос на знания фундаментальных определений раздела.

### **Тема 4. Двухатомные и многоатомные молекулы.**

устный опрос , примерные вопросы:

Опрос на знания фундаментальных определений раздела.

### **Тема 5. Зачет.**

отчет , примерные вопросы:

Развернутые выступления по темам дисциплинам.

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к экзамену:

1. Для частицы, движущейся в сферически симметричном поле записать интегралы движения.
2. Положительно заряженный ион атома гелия находится в первом возбужденном состоянии. Какие значения проекции момента импульса он может иметь?
3. Записать энергетический спектр и волновые функции для атома водорода.
4. Записать выражения для поправок к энергиям и волновым функциям в случае невырожденного спектра в стационарной теории возмущений.
5. Как оценить вероятность перехода из одного стационарного состояния в другое под действием нестационарного возмущения?
6. Атом водорода помещен в электрическое однородное поле  $E$ , направленно по оси  $oz$ . Найти расщепление уровня энергии, отвечающего главному квантовому числу  $n=2$ .
7. Показать, что для атомов первой группы, у которых уровни энергии опеределаются числами  $n$  и  $l$ , линейный эффект Штарка отсутствует.
8. Произвести классификацию нормальных колебаний молекулы  $NH_3$  (правильная пирамида с атомом  $N$  в вершине и атомами  $H$  в углах основания).

Виды самостоятельной работы студентов:

- 1) выполнение практических заданий по разделам курса;
- 2) выполнение контрольных работ;
- 3) подготовка к зачету.

УО-2, ПР-1, ПР-2, ТС-2, ИС-3, ТС-3, ПР-4, УО-3

### **7.1. Основная литература:**

1. Блохинцев Д.И. "Основы квантовой механики" М., Наука, 1983.
2. Давыдов А.С. "Квантовая механика" М., Наука, 1973.
3. Елютин П.В., Кривченков В.Д. "Квантовая механика с задачами", М., Наука, 1976.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. "Квантовая механика", М., Наука, 1989.
5. Соколов А.А., Тернов И.М., Жуковский В.Ч. "Квантовая механика", М., Наука, 1979.
6. Галицкий В.М., Корнаков Б.М., Коган В.И. "Задачи по квантовой механике" М., Наука, 1972.

### **7.2. Дополнительная литература:**

1. Бом Д., "Квантовая теория", М., Наука, 1965.
2. Боум А. "Квантовая механика: основы и приложения", М., Мир, 1990.
3. Гольдман И.И., Кривченков В.Д. "Сборник задач по квантовой механике", М., Гостехиздат, 1957.
4. Флюгге З. "Задачи по квантовой механике" тт. 1, 2., М., Мир, 1974.
5. Тернов И.М., Жуковский В.Ч., Борисов А.В. "Квантовая механика и макроскопические эффекты", М., Изд. Моск.Университета, 1993.

### **7.3. Интернет-ресурсы:**

Раздел учебно- методические материалы кафедрв вычислительной физики и МФП -  
[http://portal.kpfu.ru/docs/F1186022571/M1\\_12.pdf](http://portal.kpfu.ru/docs/F1186022571/M1_12.pdf)

Раздел учебно- методические материалы кафедрв вычислительной физики и МФП -  
[http://portal.kpfu.ru/docs/F1186022571/M1\\_12.pdf](http://portal.kpfu.ru/docs/F1186022571/M1_12.pdf)

Раздел учебно- методические материалы кафедрв вычислительной физики и МФП -  
[http://portal.kpfu.ru/docs/F279029957/book\\_FFT02.pdf](http://portal.kpfu.ru/docs/F279029957/book_FFT02.pdf)

Раздел учебно- методические материалы кафедрв вычислительной физики и МФП -  
[http://portal.kpfu.ru/docs/F452296309/M3\\_12.pdf](http://portal.kpfu.ru/docs/F452296309/M3_12.pdf)

Раздел учебно- методические материалы кафедрв вычислительной физики и МФП -  
[http://portal.kpfu.ru/docs/F1735838008/book\\_FTT01.pdf](http://portal.kpfu.ru/docs/F1735838008/book_FTT01.pdf)

Раздел учебно- методические материалы кафедрв вычислительной физики и МФП -  
[http://portal.kpfu.ru/docs/F374081879/M2\\_12.pdf](http://portal.kpfu.ru/docs/F374081879/M2_12.pdf)

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану**

Освоение дисциплины "Квантовая механика атомов и молекул" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 050100.68 "Педагогическое образование" и магистерской программе Образование в области физики .

Автор(ы):

Ситдиков А.С. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Мокшин А.В. \_\_\_\_\_

Сафаров Р.Х. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Лист согласования

<b>N</b>	<b>ФИО</b>	<b>Согласование</b>
1	Мокшин А. В.	
2	Мокшин А. В.	
3	Таюрский Д. А.	
4	Чижанова Е. А.	
5	Соколова Е. А.	
6	Тимофеева О. А.	