

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



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Квантовая механика атомов и молекул M2.B.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):

Хуснутдинов Р.М.

Рецензент(ы):

Мокшин А.В.

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 69114

Казань

2014

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) доцент, к.н. (доцент) Хуснутдинов Р.М. кафедра вычислительной физики и моделирования физических процессов научно-педагогическое отделение , Ramil.Husnutdinov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Цель преподавания дисциплины "Квантовая механика атомов и молекул" - дать представление об основных положениях квантовой теории атомов и молекул, приложении их для объяснения широкого круга физических явлений, научить студентов решать практические задачи а также прививать общекультурные и профессиональные навыки. Курс состоит и 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:

- основные законы механики;
- условия применимости законов механики в том или ином случае;
- особенности планирования и руководства учебно-исследовательской работой школьников по разработке механических моделей физических явлений.

2. должен уметь:

- строить механическую модель физического явления;
- применять законы механики для решения конкретных задач.

3. должен владеть:

- навыками работы с литературой по квантовой механике атомов и молекул и смежным дисциплинам;
- навыками математической формулировки физических проблем;
- методикой руководства самостоятельной работой учащихся по разработке и исследованию моделей физических явлений

4. должен демонстрировать способность и готовность:

решать задачи по квантовой механике атомов и молекул

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 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	4	0	0	письменная работа
2.	Тема 2. Строение атомов и спин электрона.	1	2	0	14	0	письменная работа
3.	Тема 3. Многоэлектронные атомы и молекулы.	2	1	4	0	0	устный опрос
4.	Тема 4. Двухатомные и многоатомные молекулы.	2	2	0	7	0	устный опрос
5.	Тема 5. Зачет.	2	3	0	7	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 (4 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.

практическое занятие (14 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 3. Многоэлектронные атомы и молекулы.

лекционное занятие (4 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. 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 4. Двухатомные и многоатомные молекулы.

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 5. Зачет.

практическое занятие (7 часа(ов)):

Природа химической связи. Атом во внешнем поле (эффект Зеемана и магнитный момент атома). 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.

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	6	письменная работа
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	6	устный опрос
5.	Тема 5. Зачет.	2	3	подготовка к отчету	8	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".

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. Давыдов А. С. Квантовая механика: учеб. пособие. 3 изд., стереотипное. СПб.: БХВ-Петербург, 2011. 704 с.: ил. (Учебная литература для вузов). - ISBN 978-5-9775-0548-2.
<http://znanium.com/catalog.php?item=booksearch&code=%D0%BA%D0%B2%D0%B0%D0%BD%D1%82>
2. Шпольский Э.В., Атомная физика. Том 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома. Издательство: "Лань", ISBN: 978-5-8114-1006-4, Год: 2010, 448 стр.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=443
3. Иродов И.Е., Квантовая физика. Основные законы, Издательство: "Бином. Лаборатория знаний" ISBN: 978-5-9963-0282-6, Год: 2010, 256 стр.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=4370
4. Физика твердого тела: Учебное пособие / Ю.А. Стрекалов, Н.А. Тенякова. - М.: ИЦ РИОР: НИЦ Инфра-М, 2013. - 307 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование: Бакалавриат). (переплет) ISBN 978-5-369-00967-3, 500 экз.
<http://znanium.com/catalog.php?item=booksearch&code=%D1%84%D0%B8%D0%B7%D0%B8%D0%BA>
5. Игнатов, А. Н. Нанoeлектроника. Состояние и перспективы развития [Электронный ресурс] : учеб. пособие / А. Н. Игнатов. ? М. : ФЛИНТА, 2012. ? 360 с. - ISBN 978-5-9765-1619-9 (<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=455222>) ЭБС Знаниум

7.2. Дополнительная литература:

1. Барыбин, А. А. Физико-химия наночастиц, наноматериалов и наноструктур [Электронный ресурс] : Учеб. пособие / А. А. Барыбин, В. А. Бахтина, В. И. Томилин, Н. П. Томилина. - Красноярск : СФУ, 2011. - 236 с. - ISBN 978-5-7638-2396-7.
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=441543> ЭБС Знаниум
2. Никеров, В. А. Физика для вузов: Механика и молекулярная физика [Электронный ресурс] : Учебник / В. А. Никеров. - М. : Издательско-торговая корпорация "Дашков и К-", 2012. - 136 с. - ISBN 978-5-394-00691-3.
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=415061> ЭБС Знаниум
3. Курс общей физики: Учебное пособие / К.Б. Канн. - М.: КУРС: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 360 с.: 60x90 1/16. (переплет) ISBN 978-5-905554-47-6, 700 экз.
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=443435> ЭБС Знаниум
4. Основы статистической физики: Учебное пособие / А.Г. Браун, И.Г. Левитина. - 3-е изд. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2015. - 120 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование: Бакалавриат). (обложка) ISBN 978-5-16-010234-4, 300 экз.
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=478437> ЭБС Знаниум
5. Физика твердого тела: Учебное пособие / Ю.А. Стрекалов, Н.А. Тенякова. - М.: ИЦ РИОР: НИЦ Инфра-М, 2013. - 307 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование: Бакалавриат). (переплет) ISBN 978-5-369-00967-3, 500 экз.
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=363421> ЭБС Знаниум

7.3. Интернет-ресурсы:

- Раздел учебно- методические материалы кафедрв вычислительной физики и МФП -
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
- Раздел учебно- методические материалы кафедрв вычислительной физики и МФП -
http://portal.kpfu.ru/docs/F374081879/M2_12.pdf

Раздел учебно- методические материалы кафедрв вычислительной физики и МФП -
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

Раздел учебно- методические материалы кафедрв вычислительной физики и МФП -
http://portal.kpfu.ru/docs/F279029957/book_FFT02.pdf

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

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

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Для обеспечения проведения лекционных и практических занятий необходимо следующее оборудование: проектор с экраном, принтер и копировальный аппарат для распечатки заданий, компьютерный класс современных персональных компьютеров.

Желательный количественный состав на практическом занятии не должен превышать 10 человек.

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):

Хуснутдинов Р.М. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Мокшин А.В. _____

"__" _____ 201__ г.