



## DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

| Dalyko (modulio) pavadinimas lietuvių kalba | Dalyko (modulio) pavadinimas anglų kalba | Kodas |
|---------------------------------------------|------------------------------------------|-------|
| Kvantinė chemija                            | Quantum chemistry                        |       |

| Dėstytojas (-ai)                               | Padalinys (-iai)                                                                         |
|------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------|
| Koordinuojantis: Kęstutis Aidas<br>Kitas (-i): | Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas<br>Naugarduko 24, LT-03225 Vilnius |

| Studijų pakopa | Dalyko (modulio) tipas |
|----------------|------------------------|
| Pirmoji        | Privalomasis           |

| Igyvendinimo forma | Vykdymo laikotarpis  | Vykdymo kalba (-os) |
|--------------------|----------------------|---------------------|
| Auditorinė         | 3 (rudens) semestras | Lietuvių            |

| Reikalavimai studijuojančiajam                                         |                                     |
|------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|
| Išankstiniai reikalavimai: Bendroji chemija, Matematika I/II, Fizika I | Gretutiniai reikalavimai (jei yra): |

| Dalyko (modulio) apimtis kreditais | Visas studento darbo krūvis | Kontaktinio darbo valandos | Savarankiško darbo valandos |
|------------------------------------|-----------------------------|----------------------------|-----------------------------|
| 5                                  | 134                         | 64                         | 70                          |

| Dalyko (modulio) tikslas: studijų programos ugdomos kompetencijos                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                            |                                |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------|--------------------------------|
| <b>Dalyko tikslai:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>supažindinti su kvantinės mechanikos teorija bei pagrindinėmis jos koncepcijomis</li> <li>supažindinti su kvantmechaniniais modeliais, kurie plačiai taikomi chemijoje molekulėms ir jų elgsenai aprašyti</li> <li>suformuoti kvantinės mechanikos pagrindų taikymo įgūdžius</li> </ul> |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                            |                                |
| Programos numatomi studijų rezultatai                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | Dalyko (modulio) studijų siekiniai                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | Studijų metodai                            | Vertinimo metodai              |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | Studentai įgis bendrosios kvantinės mechanikos teorijos pagrindus bei susipažins su svarbesniais jos taikymais molekulėms ir jų elgsenai apibūdinti. Studentai gebės: <ul style="list-style-type: none"> <li>interpretuoti cheminius reiškinius pasitelkiant kvantinės mechanikos koncepcijas</li> <li>spręsti kvantinės chemijos probleminius uždavinius</li> </ul> | Paskaitos, seminarai, savarankiškas darbas | Kolokviumas ir egzaminas raštu |

| Temos                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | Kontakt. darbo valandos |           |          |             |          | Visas kontakt. darbas | Savarankiškas darbas | Savarankiškų studijų laikas ir užduotys     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|-----------|----------|-------------|----------|-----------------------|----------------------|---------------------------------------------|
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | Paskaitos               | Seminarai | Pratybos | Lab. darbai | Praktika |                       |                      | Užduotys                                    |
| 1. Kurso apžvalga                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 1                       |           |          |             |          | 1                     |                      |                                             |
| 2. Kvantinės mechanikos formalizmas: banginė funkcija ir jos prasmė, superpozicijos principas, standartiniai reikalavimai, operatoriai kvantinėje mechanikoje, fizikinių dydžių vidurkiai, tikrinių verčių lygtis, tikrinių funkcijų ortogonalumas, operatorių komutatorius, bendroji ir stacionarioji Šrėdingerio lygtis, statistinė kvantinės mechanikos interpretacija, Haizenbergo neapibrėžtumo principas, judėjimo integralai, kvantinės mechanikos postulatai, bra-ket formalizmas. | 9                       | 10        |          |             |          | 19                    | 24                   | Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas |
| 3. Paprastosios kvantinės sistemos I: laisvos dalelės judėjimas, dalelių sklaida nuo potencinės energijos barjerų, tuneliavimas, dalelė potencinės energijos duobėje, harmoninis osciliatorius.                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 6                       | 6         |          |             |          | 12                    | 12                   | Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas |
| 4. Judesio kiekio momento teorijos pagrindai: judesio kiekio momento operatoriai ir jų komutaciniai sąryšiai, operatorių $L^2$ ir $L_z$ tikrinės vertės bei tikrinės funkcijos, operatoriai $L_+$ ir $L_-$ , judesio kiekio momento operatorių matriciniai elementai                                                                                                                                                                                                                       | 4                       | 4         |          |             |          | 8                     | 8                    | Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas |
| 5. Paprastosios kvantinės sistemos II: dalelės sukimasis plokštumoje ir trimatėje erdvėje, kietasis rotatorius.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 2                       | 2         |          |             |          | 4                     | 4                    | Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas |
| 6. Vandeniškieji atomai: Šrėdingerio lygtis ir jos sprendiniai, atominės orbitalės, energijos lygmenys, spektroskopija, elektroninių šuolių atrankos taisyklės.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 4                       | 6         |          |             |          | 10                    | 12                   | Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas |
| 7. Mikrodalelių sukinys                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 2                       | 2         |          |             |          | 4                     | 4                    | Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas |
| 8. Daugiadalelių sistemų kvantinės mechanikos pagrindai: operatoriai ir Šrėdingerio lygtis, tapatingosios dalelės, Paulio principas, Sleiterio determinantas, atomų elektroninės konfigūracijos, periodinė cheminių elementų lentelė.                                                                                                                                                                                                                                                      | 4                       | 2         |          |             |          | 6                     | 6                    | Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas |
| <b>Viso:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | <b>32</b>               | <b>32</b> |          |             |          | <b>64</b>             | <b>70</b>            |                                             |

| Vertinimo strategija | Svoris proc. | Atsiskaitymo laikas | Vertinimo kriterijai                                        |
|----------------------|--------------|---------------------|-------------------------------------------------------------|
| Kolokviumas          | 50           | Semestro metu       | Teorijos klausimai atsakyti ir uždaviniai išspręsti (raštu) |
| Egzaminas            | 50           | Sesijos metu        | Teorijos klausimai atsakyti ir uždaviniai išspręsti (raštu) |

| Autorius                      | Leidimo metai | Pavadinimas                                      | Periodinio leidinio Nr. ar leidinio tomas | Leidimo vieta ir leidykla | Prieiga internete ar VU bibliotekoje |
|-------------------------------|---------------|--------------------------------------------------|-------------------------------------------|---------------------------|--------------------------------------|
| <b>Privalomoji literatūra</b> |               |                                                  |                                           |                           |                                      |
| P. Atkins, R. Friedman        | 2011          | Molecular quantum mechanics, 5 <sup>th</sup> ed. |                                           | Oxford University Press   |                                      |
| A. Bandzaitis, D. Grabauskas  | 1975          | Kvantinė mechanika                               |                                           | Mokslas, Vilnius          |                                      |
| <b>Papildoma literatūra</b>   |               |                                                  |                                           |                           |                                      |
| D.J. Griffiths                | 2005          | Introduction to quantum mechanics                |                                           | Pearson Prentice Hall     |                                      |
| I.N. Levine                   | 2014          | Quantum chemistry, 7 <sup>th</sup> ed.           |                                           | Pearson                   |                                      |