

ĐỀ CƯƠNG CHI TIẾT HỌC PHẦN

1. Tên học phần: Hóa lượng tử (Quantum Chemistry)

- Mã số học phần: SP517
- Số tín chỉ học phần: 2 tín chỉ
- Số tiết học phần: 30 tiết lý thuyết

2. Đơn vị phụ trách học phần:

- Bộ môn: Sư phạm Hóa
- Khoa: Sư phạm

3. Điều kiện:

- Điều kiện tiên quyết: TN101, TN102

4. Mục tiêu của học phần:

Mục tiêu	Nội dung mục tiêu	CDR CTĐT
4.1	Trang bị cho người học kiến thức về các khái niệm cơ bản về lý thuyết hóa lượng tử, phân biệt được sự khác nhau giữa cơ học cổ điển và cơ học lượng tử.	2.1.3a,b
4.2	Rèn luyện cho người học khả năng phân tích, giải thích cấu trúc của một nguyên tử, phân tử thông qua phân tích và tính toán.	2.2.1.b
4.3	Phát triển cho người học khả năng diễn đạt ý tưởng một cách hiệu quả bằng kỹ năng viết.	2.2.2b
4.4	Hình thành cho người học tinh thần học tập nâng cao trình độ ở mức tự giác.	2.3a,b

5. Chuẩn đầu ra của học phần:

CDR HP	Nội dung chuẩn đầu ra	Mục tiêu	CDR CTĐT
	Kiến thức		
CO1	Trình bày được các khái niệm cơ bản về lý thuyết hóa lượng tử, các vấn đề về toán học liên quan.	4.1	2.1.3a,b
CO2	Vận dụng được cơ học lượng tử vào một số hệ đơn giản: hạt trong hộp, năng lượng của các electron π liên hợp, dao động điều hòa và phổ IR, trục quay cứng nhắc và phổ quay của phân tử hai nguyên tử.	4.2	2.2.1b
	Kỹ năng		

CDR HP	Nội dung chuẩn đầu ra	Mục tiêu	CDR CTĐT
	Kiến thức		
CO3	Giải thích và diễn đạt ý tưởng một cách hiệu quả thông qua kỹ năng viết.	4.3	2.2.2b
	Mức độ tự chủ và trách nhiệm		
CO4	Coi trọng việc học để nâng cao tri thức.	4.4	2.3a
CO5	Có ý thức hoàn thành các bài tập luyện tập đúng hạn.	4.4	2.3b

6. Mô tả tóm tắt nội dung học phần:

Học phần được thiết kế nhằm:

- Giúp cho sinh viên những hiểu biết về sự cần thiết của cơ học lượng tử qua sự sánh với cơ học cổ điển.
- Cung cấp những phương pháp, nguyên lý và áp dụng các kết quả của cơ học lượng tử vào các hệ hóa học cơ bản.
- Cung cấp kiến thức nền tảng giúp người học có những hiểu biết đúng đắn và đầy đủ về các vấn đề cơ bản của hóa học như cấu trúc điện tử trong nguyên tử, liên kết hóa học và quang phổ.

7. Cấu trúc nội dung học phần:

7.1. Lý thuyết

	Nội dung	Số tiết	CDR HP
Chương 1.	Sự hình thành của lý thuyết lượng tử	3	CO1, CO3-CO5
1.1.	Sự khác nhau giữa cơ học cổ điển và cơ học lượng tử		
1.2.	Sóng vật chất de Broglie		
1.3.	Nguyên lý bất định Heisenberg		
1.4.	Hàm sóng		
1.5.	Bài tập áp dụng		
Chương 2.	Một số cơ sở cốt lõi của cơ học lượng tử	3	CO1
2.1.	Toán tử		
2.2.	Hệ tiền đề của cơ học lượng tử		
2.3.	Xác suất để một đại lượng A có giá trị a_n		
Chương 3	Một số áp dụng của cơ học lượng tử trong hóa học	6	CO2, CO4, CO5
3.1.	Hạt trong hộp thế		
3.2.	Dao động điều hòa và phổ dao động của phân tử hai nguyên tử		
3.3.	Quay tử cứng nhắc và phổ quay của phân tử		
3.4.	Bài tập áp dụng		
Chương 4	Nguyên tử một electron	4	CO1, CO3, CO4, CO5
4.1.	Momen góc (hay momen động lượng)		
4.2.	Trường xuyên tâm		

	Nội dung	Số tiết	CĐR HP
4.3.	Nguyên tử hydro và ion dạng hydro		
4.4.	Mật độ xác suất theo góc, theo bán kính.		
4.5.	Spin của điện tử - Hàm sóng toàn phần		
4.6.	Bài tập áp dụng		
Chương 5.	Những phương pháp gần đúng giải bài toán hệ nhiều điện tử	4	CO1, CO3, CO4
5.1.	Mô hình hạt độc lập – phương pháp trường tự hợp.		
5.2.	Phương pháp biến phân Ritzo		
5.3.	Phương pháp nhiễu loạn		
5.4.	Phương pháp biến phân tuyến tính		
Chương 6.	Nguyên tử nhiều điện tử	6	CO1, CO2, CO4
6.1.	Nguyên lý Pauli		
6.2.	Định thức Slater – Orbitan nguyên tử Slater		
6.3.	Cấu hình điện tử		
6.4.	Số hạng nguyên tử		
6.5.	Bài tập áp dụng		
Chương 7	Lý thuyết MO-Huckel	4	CO1, CO2, CO4
7.1.	Quy tắc Huckel		
7.2.	Phương pháp biến phân		
7.3.	Phương pháp MO-Huckel và các hệ liên hợp		
7.4.	Mật độ điện tích và bậc liên kết π của các polyalkene		
7.5.	Chỉ số hóa trị tự do		
7.6.	Năng lượng electron π và tính thơm		

8. Phương pháp giảng dạy:

- Đặt vấn đề + Diễn giải
- Thảo luận, tự học, làm việc nhóm.

9. Nhiệm vụ của sinh viên:

Sinh viên phải thực hiện các nhiệm vụ như sau:

- Chuẩn bị bài trước khi lên lớp, nắm vững kiến thức cơ bản về toán học.
- Tham gia ít nhất 80% tổng số giờ lên lớp
- Tham dự kiểm tra giữa kỳ.
- Tham dự thi kết thúc học phần.

10. Đánh giá kết quả học tập của sinh viên:

10.1. Cách đánh giá

Sinh viên được đánh giá tích lũy học phần như sau:

TT	Điểm thành phần	Quy định	Trọng số	CDR HP
1	Điểm bài tập trên lớp	- Tham gia hoạt động học tập trong quá trình học	15%	CO4 –CO5
2	Điểm kiểm tra giữa kì	- Tham gia làm bài kiểm tra trắc nghiệm hoặc tự luận	25%	CO1 – CO3
3	Điểm thi kết thúc học phần	- Tham gia làm bài thi trắc nghiệm hoặc tự luận	60%	CO1 – CO3

10.2. Cách tính điểm

- Điểm đánh giá thành phần và điểm thi kết thúc học phần được chấm theo thang điểm 10 (từ 0 đến 10), làm tròn đến một chữ số thập phân.

- Điểm học phần là tổng điểm của tất cả các điểm đánh giá thành phần của học phần nhân với trọng số tương ứng. Điểm học phần theo thang điểm 10 làm tròn đến một chữ số thập phân, sau đó được quy đổi sang điểm chữ và điểm số theo thang điểm 4 theo quy định về công tác học vụ của Trường.

11. Tài liệu giảng dạy:

Thông tin về tài liệu	Số đăng ký cá biệt
[1] Giáo trình hóa học lượng tử / Phạm Vũ Nhật (chủ biên), Võ Hồng Thái, Đại Học Cần Thơ - Năm 2015	KH.004717 MOL.074516 MOL.074517 MOL.074518 MON.050405 MON.050406
[2] Thuyết lượng tử về nguyên tử và phân tử; T1 / Nguyễn Đình Huê.- NXB Giáo Dục – Hà Nội – Năm 2003	MOL.013793; MOL.013794; MOL.013800; MON.104839
[3] Thuyết lượng tử về nguyên tử và phân tử; T2 / Nguyễn Đình Huê.- NXB Giáo Dục – Hà Nội – Năm 2003	MON.105026
[4] Bài tập hóa lượng tử cơ sở / Lâm Ngọc Thiềm- NXB KHKT – Hà Nội – Năm 2004	MOL.014204; MOL.014205; MOL.014206; MOL.034299; MOL.034301; MOL.034302; MOL.065705; MOL.065710; MOL.065712; MON.016314

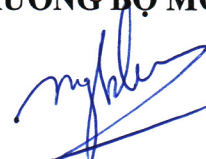
12. Hướng dẫn sinh viên tự học:

Nội dung	Lý thuyết (tiết)	Thực hành (tiết)	Nhiệm vụ của sinh viên
Chương 1:	3	0	-Nghiên cứu trước: + Tài liệu [1]: Chương 1,2 +Tài liệu [2]: nội dung từ mục 1.1 đến 1.4. Tập 1. Bài tập tài liệu [4]
Chương 2:	3	0	-Nghiên cứu trước: + Tài liệu [1]: Chương 3 +Tài liệu [2]: nội dung từ mục 2.1 đến 2.4. Tập 1. + Bài tập tài liệu [4]
Chương 3:	6	0	-Nghiên cứu trước: + Tài liệu [1]: Chương 1-3 +Tài liệu [2]: nội dung từ mục 3.1 đến 3.4. Tập 1. Bài tập tài liệu [4]
Chương 4 Kiểm tra	4	0	-Nghiên cứu trước: + Tài liệu [1]: Chương 6 +Tài liệu [2]: nội dung từ mục 5.1 đến 5.4. Tập 1. Bài tập tài liệu [4]
Chương 5:	4	0	-Nghiên cứu trước: + Tài liệu [1]: Chương 7 +Tài liệu [2]: nội dung từ mục 4.1 và 4.2. Tập 1. Bài tập tài liệu [4]
Chương 6:	6	0	-Nghiên cứu trước: + Tài liệu [1]: Chương 8 +Tài liệu [3]: nội dung từ mục 6.1 đến 6.3. Tập 2. Bài tập tài liệu [4]
Chương 7:	4		-Nghiên cứu trước: + Tài liệu [1]: Chương 11 + Tài liệu [3]: mục 7 + Bài tập tài liệu [4]

Cần Thơ, ngày 06 tháng 9 năm 2024

TL. HIỆU TRƯỞNG
TRƯỜNG KHOA

Huỳnh Anh Huy

TRƯỞNG BỘ MÔN

Nguyễn Phúc Đảm