

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 : 02 tín chỉ
- Số tiết học phần : 30 tiết lý thuyết, 60 tiết tự học.

2. Đơn vị phụ trách học phần:

- Bộ môn : Bộ môn Sư phạm Hóa
- Khoa: Sư Phạm

3. Điều kiện tiên quyết: SP292, SP093

4. Mục tiêu của học phần:

4.1. Kiến thức

4.1.1. - Nắm được các khái niệm cơ bản về lý thuyết hóa lượng tử, các vấn đề về toán học liên quan.

4.1.2. Nắm được các phương pháp giải gần đúng cho những hệ nhiều electron trong nguyên tử, phân tử.

4.1.3. Biết áp dụng cơ học lượng tử vào hóa học nhằm đi sâu vào bản chất nội tại của các quá trình hóa học một cách định lượng.

4.2. Kỹ năng

4.2.1. Vận nội dung học vào việc giải thích cấu trúc của một nguyên tử, phân tử. Phát triển, giải thích và diễn tả ý tưởng một cách hiệu quả.

4.2.2. Biết tính toán các số liệu và cách trình bày thông qua kỹ năng viết.

4.3. Thái độ

4.3.1. Nhận thức được sự cần thiết của môn học vì nó đi sâu vào bản chất nội tại của các quá trình hóa học một cách định lượng.

4.3.2. Yêu thích môn học và làm việc nghiêm túc.

5. Mô tả tóm tắt nội dung học phần:

Chương 1 giới thiệu các khái niệm cơ bản như số phức, phương trình vi phân bậc 2, toán tử, hàm riêng. Tính chất cơ bản của một hệ hạt tử đang chuyển động được khảo sát thông qua một hàm số gọi là hàm trạng thái.

Chương 2 giới thiệu về các hệ đơn giản gồm một hay nhiều hạt chuyển động trong không gian một chiều hay hai, ba chiều với các đặc tính cơ bản như năng lượng, mật độ, xác suất hiện diện...

Chương 3 đề cập đến momen góc là một đại lượng vật lý quan trọng của hệ hạt tử chuyển động được khảo sát theo hình thức toán tử momen góc vì chúng có chung nhau những hệ hàm riêng. Trong chương này kiểu mẫu nguyên tử theo cơ học lượng tử được khảo sát chi tiết để làm nền tảng cho cấu trúc điện tử trong nguyên tử nhiều điện tử.

Chương 4 giới thiệu những phương pháp giải gần đúng cho hệ hạt nhiều điện tử có sự tương tác đẩy lẫn nhau.

Chương 5 Nguyên tử nhiều điện tử là cơ sở cho liên kết hóa học, cấu trúc điện tử của các nguyên tử trong bảng phân loại tuần hoàn phải được hình thành theo một hệ thống tuần lý và thích hợp với đặc tính nguyên tử, do đó chương này những luận điểm cơ bản tương đối đơn giản và có tính phổ biến dùng trong lý thuyết hóa học.

Chương 6,7 và 8 đưa ra cơ sở lý luận của 2 phương pháp liên kết hóa trị và obitan phân tử để giải thích và mô tả các liên kết hóa học trong một phân tử đi từ đơn giản đến phức tạp.

6. Cấu trúc nội dung học phần

6.1. Lý thuyết

	Nội dung	Số tiết	Mục tiêu
Chương 1.	Hàm sóng và toán tử	3	4.1; 4.2; 4.3; 4.1.1;4.1.2; 4.2.3.
	1.1. Toán tử		
	1.2. Hàm sóng		4.1; 4.2; 4.3
	1.3. Hàm riêng và trị riêng của toán tử tuyến tính		4.1.1; 4.2.1;4.3.1
Chương 2.	Các tiên đề của cơ học lượng tử và áp dụng	4	4.1; 4.2; 4.3; 4.1.1;4.1.2; 4.2.3. 4.1.1; 4.1.2;4.1.3
	2.1. Các tiên đề của cơ học lượng tử		4.1.1; 4.1.2;4.1.3
	2.2. Trạng thái dừng		
	2.3. Áp dụng vào một số hệ hạt đơn giản		4.1.1; 4.1.2;4.1.3
	2.4. Bài tập áp dụng		
Chương 3.	Nguyên tử một điện tử	5	4.1; 4.2; 4.3; 4.1.1;4.1.2; 4.2.3. 4.1.1;4.1.2; 4.2.2
	3.1. Momen góc (hay momen động lượng)		4.1.1;4.1.2; 4.2.2
	3.2. Trường xuyên tâm		4.1.2;4.2.1; 4.2.2
	3.3. Nguyên tử hydro và ion dạng hydro		4.1.2;4.2.1; 4.2.2; 4.2.3.
	3.4. Mật độ xác suất theo góc, theo bán kính.		4.1; 4.2; 4.3
	3.5. Spin của điện tử - Hàm sóng toàn phần		4.1; 4.2; 4.3
	3.6. Bài tập áp dụng		
Chương 4.	Những phương pháp gần đúng giải bài toán hệ nhiều điện tử	4	4.1; 4.2; 4.3; 4.1.1;4.1.2; 4.2.3.
	4.1. Mô hình hạt độc lập – phương pháp trường tự hợp.		4.1.2;4.2.1
	4.2. Phương pháp biến phân Ritzơ		4.1.3;4.2.1
	4.3. Phương pháp nhiễu loạn		4.1.1;4.1.2; 4.2.3.
	4.4. Phương pháp biến phân tuyến tính		
Chương 5.	Nguyên tử nhiều điện tử	4	4.1; 4.2; 4.3; 4.1.1;4.1.2; 4.2.3.
	5.1 Nguyên lý Pauli		4.1; 4.2; 4.3
	5.2 Định thức Slater – Orbitan nguyên tử Slater		4.1; 4.2; 4.3
	5.3 Cấu hình điện tử		4.1; 4.2; 4.3

5.4	Số hạng nguyên tử		4.1; 4.2; 4.3
5.5	Quang phổ của nguyên tử nhiều điện tử.		4.1; 4.2; 4.3
5.6	Bài tập áp dụng		
Chương 6.	Cơ sở lý luận của phương pháp obitan phân tử và phương pháp liên kết hóa trị	4	4.1; 4.2; 4.3; 4.1.1; 4.1.2; 4.2.3.
6.1.	Đại cương về sự khảo sát phân tử bằng cơ học lượng tử.	...	4.1.1; 4.1.2
6.2.	Bài toán H ₂ theo phương pháp liên kết hóa trị	...	4.1.1; 4.1.2
6.3	Bài toán H ₂ theo phương pháp obitan phân tử	...	4.1.1; 4.1.2 4.1.3
6.4	So sánh những điểm giống và khác nhau giữa 2 phương pháp.		4.1; 4.2; 4.3
Chương 7.	Các phân tử phức tạp hơn H₂	3	4.1; 4.2; 4.3; 4.1.1; 4.1.2; 4.2.3.
7.1.	Các vấn đề chung		
7.2.	Phương pháp VB		4.1.2; 4.1.3
7.3.	Phương pháp MO		4.1.2; 4.2.1
Chương 8.	Liên kết trong các hợp chất liên hợp	3	4.1; 4.2; 4.3; 4.1.1; 4.1.2; 4.2.3.
8.1.	Phương pháp VB		4.1; 4.2; 4.3
8.2.	Phương pháp MO - Huckel		4.1; 4.2; 4.3
8.3.	Bài tập áp dụng		4.1; 4.2; 4.3

7. Phương pháp giảng dạy:

- Đặt tình huống + Diễn giải
- Thảo luận, tự học, làm việc nhóm.

8. 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.

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

9.1. Cách đánh giá

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

TT	Điểm thành phần	Quy định	Trọng số	Mục tiêu
1.	Điểm kiểm tra giữa kỳ	- Bài tập, kiểm tra giữa kỳ	30%	4.1.1; 4.1.2, 4.2.2; 4.3.2
2.	Điểm thi kết thúc học phần	- Thi tự luận (120 phút), - Bắt buộc dự thi	70%	4.1.1; 4.1.2, 4.2.2; 4.3.2

9.2. Cách tính điểm

