《量子化学基础》课程教学大纲

**一、课程基本信息**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **英文名称** | Fundamentals of Quantum Chemistry | **课程代码** | CHEM3011 |
| **课程性质** | 专业选修课程 | **授课对象** | 化学 |
| **学 分** | 2 | **学 时** | 36 |
| **主讲教师** | 樊建芬 | **修订日期** | 2023.4.30 |
| **指定教材** | 陈光巨，黄元河，《量子化学》，华东理工大学出版社，2008年。 |

**二、课程目标**

（一）**总体目标：**

《量子化学基础》是理论化学的一个分支学科，是近代化学的理论基础。本课程旨在介绍量子化学的基本原理和方法，主要涉及量子化学的现状及发展概况、量子力学基础、某些简单体系定态薛定谔方程的解、电子自旋和角动量、微扰理论、自洽场分子轨道理论、密度泛函理论以及相关的计算软件。通过本课程的学习使学生掌握量子力学的基本原理、基本方法及在各类化学体系中的应用，学会利用量子力学方法分析物质结构。在教学过程中培养学生独立思考、自主探究、实事求是、严谨认真的科学素养，使学生在更高水平上理解化学中的各种现象，为将来从事科学研究及相关工作奠定基础。

（二）课程目标：

**课程目标1：**了解量子化学的发展概况、现状及其重要应用；掌握算符相关的基本概念、量子力学基本假设及薛定谔方程对谐振子及类氢离子体系的应用。

1.1了解量子化学的发展概况、现状及其重要应用；掌握算符相关的基本概念、量子力学基本假设。

1.2掌握薛定谔方程对谐振子及类氢离子体系的应用。

**课程目标2：**理解电子的运动特征，掌握角动量基本概念；理解电子相关，掌握组态与谱项。

2.1理解电子的运动特征，掌握角动量基本概念。

2.2理解电子相关，掌握组态与谱项。

**课程目标3：**理解变分法及微扰理论；掌握自洽场分子轨道法；理解量子化学从头算、各种半经验分子轨道法及密度泛函理论等方法。

3.1理解变分法及微扰理论

3.2掌握自洽场分子轨道法；理解量子化学从头算、各种半经验分子轨道法及密度泛函理论等方法

**课程目标4：**掌握大型量子化学计算程序及配套程序的使用。能够针对目标分子体系及研究问题，选用合理的量子化学的研究方法，实现有效的电子结构性质分析。建立量子化学研究问题的思想和方法，构建“化学核心素养”基本理念，从量子化学的视角分析与解决实际问题。

（三）课程目标与毕业要求、课程内容的对应关系

**表1：课程目标与课程内容、毕业要求的对应关系表**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **课程目标** | **课程子目标** | **对应课程内容** | **对应毕业要求** |
| 课程目标1 | 1.1 | 绪论第1章　算符代数和量子力学基本原理1.1　算符1.2　薛定谔方程1.3　力学量算符1.4　量子力学基本假设 | 对应毕业要求1：基础知识：能够熟练掌握与化学相关的自然科学学科相关基础理论；系统掌握化学基础理论和基础知识。 |
| 1.2 | 第2章　简单体系的薛定谔方程及其解2.1　一维谐振子2.3　类氢离子2.4 特殊算符的本征函数和本征值 | 对应毕业要求1：基础知识：能够熟练掌握与化学相关的自然科学学科相关基础理论；系统掌握化学基础理论和基础知识。 |
| 课程目标2 | 2.1 | 2.2　角动量第4章　多电子原子结构4.1　电子自旋、Pauli原理和Hund规则 | 对应毕业要求1：基础知识：能够熟练掌握与化学相关的自然科学学科相关基础理论；系统掌握化学基础理论和基础知识。 |
| 2.2 | 4.2　电子相关、组态与谱项、自旋与轨道作用 | 对应毕业要求1：基础知识：能够熟练掌握与化学相关的自然科学学科相关基础理论；系统掌握化学基础理论和基础知识。 |
| 课程目标3 | 3.1 | 第3章　量子力学中的两种近似方法—变分法和微扰法3.1　变分法3.2　微扰理论 | 对应毕业要求1：基础知识：能够熟练掌握与化学相关的自然科学学科相关基础理论；系统掌握化学基础理论和基础知识。 |
| 3.2 | 第5章　双原子分子结构5.1　Born-Oppenheimer近似5.2　双原子分子中的核运动5.3　氢分子离子的量子力学精确解和近似解5.4　H2+的激发态的分子轨道5.5　双原子分子的分子轨道法第6章　多原子分子结构6.1　多原子分子电子结构6.2　多原子分子的自洽场分子轨道法处理第7章　计算化学简介7.1　量子化学从头算方法7.2　半经验分子轨道方法7.3　密度泛函理论 | 对应毕业要求1：基础知识：能够熟练掌握与化学相关的自然科学学科相关基础理论；系统掌握化学基础理论和基础知识。 |
| 课程目标4 | / | 第8章 量子化学计算相关软件介绍及应用 | 对应毕业要求2：问题分析：能够应用化学学科的基本原理解释和分析化学反应现象和理解反应本质；通过专业课程学习深度分析出专业知识的发展方向以及明确其应用前景。 |

**三、教学内容**

**绪论**

**1.教学目标**

了解量子化学的发展概况、现状和重要应用，明确本课程内容安排。

**2.教学重难点**

量子化学在分子反应机理方面的应用

**3.教学内容**

一、量子化学的发展概况和现状

二、量子化学的重要应用

三、课程内容安排

四、参考书目

**4.教学方法**

（1）讲授法：通过教师在课堂上讲授量子化学相关的基本概念和基本原理，帮助学生了解量子化学的发展概况、现状及其重要应用。

（2）讨论法：组织学生讨论量子化学中两种流派（VBT、MOT），量子化学计算在科学研究中的作用。

（3）读书指导法：指导学生阅读课外参考书、网上相关知识。

**5.教学评价**

要求每位学生完成约2个书面作业及2个课后思考题，从中明晰量子化学的发展概况、现状和重要应用，特别是在分子反应机理方面相关研究的应用。

**第一章 算符代数和量子力学基本原理**

**1.教学目标**

掌握算符相关的基本概念及薛定谔方程，掌握力学量算符及量子力学基本假设。

**2.教学重难点**

（1）厄米算符的定义

（2）算符的对易性

（3）不同力学量同时有确定值的条件

（4）全同性原理

**3.教学内容**

1.1算符

1.1.1基本概念

1.1.2线性算符与厄米算符

1.2 薛定谔方程

1.2.1状态函数和概率

1.2.2 薛定谔方程

1.2.3原子单位和Dirac符号

1.3力学量算符

1.3.1算符与量子力学

1.3.2态的叠加原理

1.3.3不同力学量同时有确定值的条件

1.4量子力学基本假设

1.4.1假设Ⅰ——波函数和概率

1.4.2假设Ⅱ——力学量与线性厄米算符

1.4.3假设Ⅲ——力学量的本征函数和本征值

1.4.4假设Ⅳ——状态随时间变化的薛定谔方程

1.4.5假设Ⅴ——全同性原理与保利原理

**4.教学方法**

（1）讲授法：通过教师在课堂上讲授量子化学相关的基本概念和基本原理，帮助学生了掌握算符相关的基本概念、量子力学基本假设及薛定谔方程。

（2）读书指导法：指导学生阅读课外参考书、网上相关知识以及相关视频教学。

**5.教学评价**

要求每位学生完成约5个书面作业及3个课后思考题，从中掌握算符相关的基本概念及Schrödinger方程，掌握力学量算符及量子力学基本假设。

**第二章 简单体系的薛定谔方程及其解**

**1.教学目标**

理解一维谐振子的解及其对二维、三维谐振子的拓展，掌握角动量基本概念，理解类氢离子的解。

**2.教学重难点**

（1）谐振子的薛定谔方程的求解

（2）角动量的阶梯算符法

**3.教学内容**

2.1一维谐振子

2.1.1谐振子遵循Hooke定律

2.1.2谐振子的Schrödinger方程及其解

2.1.3解的讨论

2.1.4谐振子解释双原子分子的红外光谱

2.1.5 二维、三维谐振子运动

2.2角动量

2.2.1单粒子体系的角动量

2.2.2角动量的阶梯算符法

2.3类氢离子

2.3.1中心力场问题

2.3.2双粒子问题约化为单粒子问题

2.3.3类氢离子的Schrodinger方程的解

2.3.4类氢轨道

2.4特殊算符的本征函数和本征值

2.4.1宇称算符

**4.教学方法**

（1）讲授法：通过教师在课堂上讲授量子化学相关的基本概念和基本原理，帮助学生理解Schrödinger方程对谐振子及类氢离子体系的应用及其解的讨论；掌握角动量的概念以及角动量的阶梯算符法。

（2）读书指导法：指导学生阅读课外参考书、网上相关知识以及相关视频教学。

**5.教学评价**

要求每位学生完成约6个书面作业及3个课后思考题，从中理解一维谐振子的解及其对二维、三维谐振子的拓展，掌握角动量基本概念，理解类氢离子的解。

**第三章 量子力学中的两种近似方法—变分法和微扰法**

**1.教学目标**

理解变分法、微扰法及其简单应用。

**2.教学重难点**

（1）变分原理

（2）非线性变分法对氦原子基态的处理

（3）微扰法原理及其对氦原子基态的处理

**3.教学内容**

3.1变分法

3.1.1变分原理与变分法

3.1.2 线性变分函数与线性变分法

3.1.3 丁二烯分子π 电子的变分处理

3.1.4 非线性变分法与氦原子基态的变分处理

3.2微扰理论

3.2.1 微扰的概念

3.2.2非简并能级的微扰理论

3.2.3 简并能级的微扰理论

3.2.4 氦原子基态的微扰处理

**4.教学方法**

（1）讲授法：通过教师在课堂上讲授量子化学相关的基本概念和基本原理，帮助学生理解变分法及微扰理论。

（2）讨论法：组织学生讨论变分法及微扰法处理分子体系电子结构的优缺点。

（3）读书指导法：指导学生阅读课外参考书、网上相关知识以及相关视频教学。

**5.教学评价**

要求每位学生完成约4个书面作业及2个课后思考题，从中理解变分法、微扰法及其简单的应用。

**第四章 多电子原子结构**

**1.教学目标**

掌握电子自旋、Pauli原理和Hund规则，理解电子相关、自旋与轨道作用，掌握多电子组态与谱项。

**2.教学重难点**

（1）电子相关

（2）多电子组态的谱项推求

**3.教学内容**

4.1电子自旋、Pauli原理和Hund规则

4.1.1 电子自旋

4.1.2 Pauli原理、Hund规则和核外电子的排布

4.1.3 Slater行列式

4.2 电子相关、组态与谱项、自旋与轨道作用

4.2.1 电子相关

4.2.2 组态与谱项

**4.教学方法**

（1）讲授法：通过教师在课堂上讲授量子化学相关的基本概念和基本原理，帮助学生掌握电子排布规则，理解电子相关，掌握组态与谱项。

（2）讨论法：组织学生讨论多电子体系的谱项。

（3）读书指导法：指导学生阅读课外参考书、网上相关知识以及相关视频教学。

**5.教学评价**

要求每位学生完成约4个书面作业及2个课后思考题，从中掌握电子自旋、Pauli原理和Hund规则，理解电子相关、自旋与轨道作用，掌握多电子组态与谱项。

**第五章 双原子分子结构**

**1.教学目标**

理解核固定近似、基态H2+的量子力学近似解、H2+激发态的分子轨道，掌握同核及异核双原子分子的分子轨道法。

**2.教学重难点**

（1）线性变分法对H2+基态的近似求解

（2）异核双原子分子轨道及其能级序

**3.教学内容**

5.1 Born-Oppenheimer近似

5.2 双原子分子中的核运动

5.3 氢分子离子的量子力学精确解和近似解

5.3.1 H2+基态的Schrödinger方程

5.3.2 H2+基态的近似解

5.4 H2+的激发态的分子轨道

5.5 双原子分子的分子轨道法

5.5.1 同核双原子分子轨道能级序

5.5.2 异核双原子分子轨道能级序

**4.教学方法**

（1）讲授法：通过教师在课堂上讲授量子化学相关的基本概念和基本原理，帮助学生理解核固定近似、基态H2+的量子力学近似解、H2+激发态的分子轨道以及同核和异核双原子分子的分子轨道法。

（2）讨论法：组织学生讨论CO和NO分子的电子结构特征。

（3）读书指导法：指导学生阅读课外参考书、网上相关知识以及相关视频教学。

**5.教学评价**

要求每位学生完成约2个书面作业及2个课后思考题，从中理解H2+基态及激发态的分子轨道，掌握同核和异核双原子分子的分子轨道法。

**第六章 多原子分子结构**

**1.教学目标**

掌握三大近似对多原子分子体系Schrödinger方程的应用，理解多原子分子的自洽场分子轨道法处理。

**2.教学重难点**

（1）单电子近似

（2）多原子分子体系的自洽场模型

（3）Hartree-Fock-Roothaan方程

**3.教学内容**

6.1多原子分子电子结构

6.1.1多原子分子的分子轨道法

6.2多原子分子的自洽场分子轨道法处理

6.2.1 变分原理

6.2.2 自洽场模型

6.2.3 LCAO-MO和罗汤方程

**4.教学方法**

（1）讲授法：通过教师在课堂上讲授量子化学相关的基本概念和基本原理，帮助学生掌握多原子分子电子结构、自洽场分子轨道法及Hartree-Fock-Roothaan方程。

（2）讨论法：组织学生讨论量子化学计算中的三大近似在分子轨道计算中的应用。

（3）读书指导法：指导学生阅读课外参考书、网上相关知识以及相关视频教学。

**5.教学评价**

要求每位学生完成约3个书面作业及2个课后思考题，从中掌握三大近似对多原子分子体系Schrödinger方程的应用，理解多原子分子的自洽场分子轨道法处理及Hartree-Fock- Roothaan方程。

**第七章 计算化学简介**

**1.教学目标**

理解量子化学从头算方法和密度泛函理论，了解半经验分子轨道方法。

**2.教学重难点**

（1）基组及基函数

（2）自洽场迭代

**3.教学内容**

7.1　量子化学从头算方法

7.1.1 基组

7.1.2 方法

7.1.3 分子积分

7.1.4 自洽场计算

7.2　半经验分子轨道方法

7.3　密度泛函理论

7.3.1 The Hohenberg-Kohn Theorem

7.3.2 The Hohenberg-kohn Variational Theorem

7.3.3 The Kohn-Sham Method

7.3.4 Comments on the DFT Methods

**4.教学方法**

（1）讲授法：通过教师在课堂上讲授量子化学相关的基本概念和基本原理，帮助学生掌握量子化学计算中基组及基函数，理解量子化学从头算、各种半经验分子轨道法及密度泛函理论等方法。

（2）讨论法：组织学生讨论量子化学中半经验分子轨道方法、Hatree-Fock从头算、密度泛函理论以及微扰方法的优缺点。

（3）读书指导法：指导学生阅读课外参考书、网上相关知识以及相关视频教学。

**5.教学评价**

要求每一位学生完成约3个书面作业及2个课后思考题，从中掌握量子化学计算中的基组，理解从头算方法和密度泛函理论，了解半经验分子轨道方法。

**第八章 量子化学计算相关软件介绍**

**1.教学目标**

掌握大型量子化学计算程序及相关辅助程序的配套使用。针对目标分子体系及研究问题，选用合理的量子化学的研究方法，实现有效的电子结构性质分析。

**2.教学重难点**

（1）分子体系中各原子的内左标，特别是二面角

（2）标准坐标

**3.教学内容**

8.1 Gaussian软件使用入门

8.1.1 从头计算程序框架

8.1.2 Gaussian程序的输入格式

8.1.3 Gaussian 计算功能

8.2辅助工具软件简介及其应用

8.2.1 ChemOffice

8.2.2 GaussView

8.2.3 EditPlus

8.2.4 辅助工具软件应用举例

8.3计算实例

8.3.1分子构型优化

8.3.2 IR光谱的计算

**4.教学方法**

（1）讲授法：通过教师在课堂上讲授量子化学相关的基本概念和基本原理，帮助学生掌握大型量子化学计算程序及配套程序的使用，针对目标分子体系及研究问题，选用合理的量子化学的研究方法，实现有效的电子结构性质分析。

（2）演示法：通过课堂展示Gaussian程序的运行（包括输入及输出等）、辅助工具软件的使用。

（3）读书指导法：指导学生阅读课外参考书、网上相关知识以及相关视频教学。

（5）实践活动法：布置每位学生在自己的电脑上完成一份量子化学计算大作业。

**5.教学评价**

要求每位学生完成约2个书面作业及3个课后思考题，从中掌握大型量子化学计算程序及相关辅助程序的配套使用。

**四、学时分配**

**表2：各章节的具体内容和学时分配表**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 章节 | 章节内容 | 学时分配 |
| 绪论 | 绪论 | 2 |
| 第一章 | 算符代数和量子力学基本原理 | 5 |
| 第二章 | 简单体系的Schrödinger方程及其解 | 7 |
| 第三章 | 量子力学中的两种近似方法—变分法和微扰法 | 4 |
| 第四章 | 多电子原子结构 | 4 |
| 第五章 | 双原子分子结构 | 2 |
| 第六章 | 多原子分子结构 | 4 |
| 第七章 | 计算化学简介 | 5 |
| 第八章 | 量子化学计算相关软件介绍 | 3 |
| 总计 | 36 |

**五、教学进度**

**表3：教学进度表**

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 周次 | 日期 | 章节名称 | 内容提要 | 授课时数 | 作业及要求 | 备注 |
| 1 |  | 绪论 | 一、量子化学的发展概况和现状二、量子化学的重要应用三、课程内容安排四、参考书目 | 2 | 作业：约2个书面作业+2个课后思考题要求：了解量子化学的发展概况、现状和重要应用，明确本课程内容安排 |  |
| 2-4 |  | 第一章 算符代数和量子力学基本原理 | 1.1算符1.2 薛定谔方程1.3力学量算符1.4量子力学基本假设 | 5 | 作业：约5个书面作业+3个课后思考题要求：掌握算符相关的基本概念及Schrödinger方程，掌握力学量算符及量子力学基本假设 |  |
| 4-7 |  | 第二章 简单体系的Schrödinger方程及其解 | 2.1一维谐振子2.2角动量2.3类氢离子2.4特殊算符的本征函数和本征值 | 7 | 作业：约6个书面作业+3个课后思考题要求：理解一维谐振子的解及其对二维、三维谐振子的拓展，掌握角动量基本概念，理解类氢离子的解 |  |
| 8-9 |  | 第三章 量子力学中的两种近似方法—变分法和微扰法 | 3.1变分法3.2微扰理论 | 4 | 作业：约4个书面作业+2个课后思考题要求：理解变分法和微扰理论及其简单应用 |  |
| 10-11 |  | 第四章 多电子原子结构 | 4.1电子自旋、Pauli原理和Hund规则4.2 电子相关、组态与谱项、自旋与轨道作用 | 4 | 作业：约4个书面作业+2个课后思考题要求：掌握电子自旋、Pauli原理和Hund规则，理解电子相关、自旋与轨道作用，掌握多电子组态与谱项 |  |
| 12 |  | 第五章 双原子分子结构 | 5.1 核固定近似5.2 双原子分子中的核运动5.3 氢分子离子的量子力学精确解和近似解5.4 H2+的激发态的分子轨道5.5 双原子分子的分子轨道法 | 2 | 作业：约2个书面作业+2个课后思考题要求：理解核固定近似,理解基态H2+的量子力学近似解、H2+激发态的分子轨道，掌握同核和异核双原子分子的分子轨道法。 |  |
| 13-14 |  | 第六章 多原子分子结构 | 6.1多原子分子电子结构6.2多原子分子的自洽场分子轨道法处理 | 4 | 作业：约3个书面作业+2个课后思考题要求：掌握多原子分子电子结构，理解多原子分子的自洽场分子轨道法处理 |  |
| 15-17 |  | 第七章 计算化学简介 | 7.1　量子化学从头算方法7.2　半经验分子轨道方法7.3　密度泛函理论 | 5 | 作业：约3个书面作业+2个课后思考题要求：理解量子化学从头算方法，了解半经验分子轨道方法，理解密度泛函理论 |  |
| 17-18 |  | 第八章 量子化学计算相关软件介绍 | 8.1 Gaussian软件使用入门8.2辅助工具软件简介及其应用8.3计算实例 | 3 | 作业：约2个书面作业+3个课后思考题要求：掌握大型量子化学计算程序的使用 |  |

**六、教材及参考书目**

1．唐敖庆，《量子化学》，科学出版社, 1982年。

2．I. N. Levine,《Quantum Chemistry》,7th Edition, Pearson Education, New York. 2013。

3. [徐光宪](https://book.douban.com/search/%E5%BE%90%E5%85%89%E5%AE%AA)，[黎乐民](https://book.douban.com/search/%E9%BB%8E%E4%B9%90%E6%B0%91)，[王德民](https://book.douban.com/search/%E7%8E%8B%E5%BE%B7%E6%B0%91)，陈敏伯，《量子化学—基本原理和从头计算法》，科学出版社，2007。

4. 刘成卜，《量子化学》，科学出版社，2020年。

5. 陈念陔，高坡、乐征宇，《量化学理论基础》，哈尔滨工业大学出版社，2002。

6. 黄明宝，《量子化学教程》，科学出版社，2021年。

**七、教学方法**

**1．讲授法**：通过教师在课堂上讲授量子化学相关的基本概念和基本原理，帮助学生了解量子化学的发展概况、现状及其重要应用；掌握算符相关的基本概念、量子力学基本假设及Schrodinger方程对谐振子及类氢离子体系的应用；理解变分法及微扰理论；掌握角动量基本概念；理解电子相关，掌握组态与谱项；掌握双原子分子的分子轨道法；掌握多原子分子电子结构及其自洽场分子轨道法；理解量子化学从头算、各种半经验分子轨道法及密度泛函理论等方法；掌握大型量子化学计算程序及配套程序的使用。

**2．讨论法：**组织学生讨论量子化学中两种流派（VBT、MOT）、量子化学计算在科学研究中的作用、量子化学计算中的三大近似在分子轨道计算中的应用、半经验分子轨道方法、Hatree-Fock从头算、密度泛函理论以及微扰方法的优缺点。

**3．演示法：**通过课堂展示Gaussian程序的运行（包括输入及输出等）、辅助工具软件的应用、以及开展分子构型优化及频率计算实例操作。

**4．读书指导法**：指导学生阅读课外参考书、网上相关知识以及相关视频教学。

**5．实践活动法：**布置每位学生在自己的电脑上完成一份量子化学计算大作业。

 **八、考核方式及评定方法**

**（一）课程考核与课程目标的对应关系**

**表4：课程考核与课程目标的对应关系表**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **课程目标** | **考核要点** | **考核方式** |
| 课程目标1 | 算符相关的基本概念、量子力学基本假设及薛定谔方程对谐振子及类氢离子体系的应用 | 平时作业期中和期末试卷测试 |
| 课程目标2 | 电子的运动特征、角动量的基本概念、电子相关及组态与原子谱项 | 平时作业期中和期末试卷测试 |
| 课程目标3 | 变分法及微扰理论、自洽场分子轨道法、从头算、各种半经验分子轨道法及密度泛函理论 | 平时作业期中和期末试卷测试 |
| 课程目标4 | 量子化学计算程序及配套程序的使用，针对目标分子体系及研究问题，选用合理的量子化学的研究方法，实现有效的电子结构性质分析。 | 课后大作业期末试卷测试 |

**（二）评定方法**

**1．评定方法**

平时成绩：20%（考勤与提问、考察，平时作业等）

期中考试：30%（试卷测试）

期末考试：50%（试卷测试）

**2．课程目标的考核占比与达成度分析**

**表5：课程目标的考核占比与达成度分析表**（五号宋体）

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  **考核占比****课程目标** | **平时** | **期中** | **期末** | **总评达成度** |
| 课程目标1 | 30% | 45% | 10% | 分目标达成度={0.2ｘ平时分目标成绩+0.3ｘ期中分目标成绩+0.5ｘ期末分目标成绩}/分目标总分 |
| 课程目标2 | 30% | 45% | 30% |
| 课程目标3 | 30% | 10% | 45% |
| 课程目标4 | 10% | 0% | 15% |

**（三）评分标准** （小四号黑体）

| **课程****目标** | **评分标准** |
| --- | --- |
| **90-100** | **80-89** | **70-79** | **60-69** | **＜60** |
| **优** | **良** | **中** | **合格** | **不合格** |
| **A** | **B** | **C** | **D** | **F** |
| **课程****目标1** | 掌握量子化学的发展概况、现状及其重要应用，能够全面深入理解算符相关的基本概念、量子力学基本假设，扎实掌握薛定谔方程对谐振子及类氢离子体系的应用。 | 较好掌握量子化学的发展概况、现状及其重要应用，正确理解算符相关的基本概念、量子力学基本假设，较扎实掌握薛定谔方程对谐振子及类氢离子体系的应用。 | 知晓量子化学的发展概况、现状及其重要应用，能理解算符相关的基本概念、量子力学基本假设，能将薛定谔方程应用到谐振子及类氢离子体系。 | 了解量子化学的发展概况、现状及其重要应用，基本理解算符相关的基本概念、量子力学基本假设，基本掌握薛定谔方程对谐振子及类氢离子体系的应用。 | 不了解量子化学的发展概况、现状及其重要应用，不理解算符相关的基本概念、量子力学基本假设，没有掌握薛定谔方程对谐振子及类氢离子体系的应用。 |
| **课程****目标2** | 能够全面深入理解电子的运动特征，扎实掌握角动量基本概念，理解电子相关，扎实掌握组态与原子谱项对原子状态的描述。 | 较好理解电子的运动特征，较扎实掌握角动量基本概念，理解电子相关，较扎实掌握组态与原子谱项对原子状态的描述。 | 能理解电子的运动特征及角动量基本概念，清楚电子相关及组态的概念，能用原子谱项描述原子的状态。 | 基本理解电子的运动特征，基本掌握角动量基本概念，基本理解电子相关及组态，以及原子谱项的概念。 | 不能理解电子的运动特征，没有掌握角动量基本概念，没有理解电子相关及组态及原子谱项的概念 |
| **课程****目标3** | 能深入理解变分法及微扰理论，扎实掌握自洽场分子轨道法，能深入理解量子化学从头算、各种半经验分子轨道法及密度泛函理论等方法。 | 能较好理解变分法及微扰理论，较扎实掌握自洽场分子轨道法，较深入理解量子化学从头算、各种半经验分子轨道法及密度泛函理论等方法。 | 理解变分法、微扰理论及自洽场分子轨道法，清楚量子化学从头算、各种半经验分子轨道法及密度泛函理论等方法。 | 基本理解变分法及微扰理论，基本掌握自洽场分子轨道法，基本弄懂量子化学从头算、各种半经验分子轨道法及密度泛函理论等方法。 | 不能理解变分法及微扰理论，没有掌握自洽场分子轨道法，没能理解量子化学从头算、各种半经验分子轨道法及密度泛函理论等方法。 |
| **课程****目标4** | 扎实掌握大型量子化学计算程序及配套程序的使用，能够针对目标分子体系及研究问题，正确选用合理的量子化学的研究方法，实现有效的电子结构性质分析。 | 熟练掌握大型量子化学计算程序及配套程序的使用，能够针对目标分子体系及研究问题，选用较为合理的量子化学的研究方法，实现有效的电子结构性质分析。 | 清楚大型量子化学计算程序及配套程序的使用，能够针对目标分子体系及研究问题，选用可行的量子化学的研究方法，开展相应的研究。 | 基本掌握大型量子化学计算程序及配套程序的使用，能够针对目标分子体系及研究问题，选用基本合理的量子化学的研究方法，开展相应的研究。 | 没有掌握大型量子化学计算程序及配套程序的使用，不能针对目标分子体系及研究问题选用合理的量子化学的研究方法。 |