

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет

Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

**Заступник декана
з навчальної роботи**



Handwritten signature of Natalya Usenko

Наталія УСЕНКО

«30» 06 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

КВАНТОВА ХІМІЯ

для здобувачів освіти

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	бакалавр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	обов'язкова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	6
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладач: доцент Яцимирський Андрій Віталійович

Пролонговано: на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

Розробник: Яцимирський Андрій Віталійович, доц., к.х.н., доцент кафедри фізичної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри фізичної хімії

 Ігор ФРИЦЬКИЙ

Протокол № 6 від «02» травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від «29» червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

« 30 » червня 2022 року

1. Мета дисципліни – полягає в поясненні природи хімічного зв'язку за допомогою апарату квантової механіки.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни
Знати основи фізики та хімії, а також володіти необхідним математичним апаратом, включаючи інтегрування та диференціювання.

3. Анотація навчальної дисципліни

Викладаються основні підходи до квантово-хімічного описання систем та використання відповідного математичного апарату. Розглянута теорія хімічного зв'язку для дво- і багатоатомних молекул. Показано застосування теорії симетрії з елементами теорії груп для інтерпретації хімічного зв'язку в багатоатомних молекулах.

4. Завдання (навчальні цілі):

Надання студентам знань за основними напрямками квантової хімії та її застосування для квантово-хімічного опису різних систем: модельні системи, одно- і багато електронні атоми, прості та складні молекули.

Зміст курсу входить до обов'язкового мінімуму професійних знань хіміка, особливо науковця. Розуміння природи виникнення хімічного зв'язку, а також розуміння основних моделей є необхідним для опанування сучасних підходів хімічної науки.

Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на досягнення наступних загальних та спеціальних (фахових) компетентностей: ЗК1, ЗК2, ЗК3, ЗК10 та СК1, СК2, СК3, СК7, СК8, СК9.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1 – знати; 2 – уміти; 3 – комунікація)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1 Основні поняття та навички апарату квантової механіки, теорії симетрії, математики, фізики тощо, які задіяні в квантовій хімії.	Лекції, практичні заняття	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	15
2.1 Уміти користуватися поняттями атомних орбіталей	Лекції, практичні заняття	Захист модульних контрольних робіт; перевірка завдань самостійної роботи.	25
2.2 Уміти користуватися поняттями електронних конфігурацій	Лекції, практичні заняття	Захист модульних контрольних робіт; перевірка завдань самостійної роботи.	5
2.3 Уміти користуватися характеристиками атома: енергії	Лекції, практичні заняття	Захист модульних контрольних робіт;	5

іонізації, спорідненості до електрону, електронегативності		перевірка завдань самостійної роботи.	
2.4 Інтерпретувати походження хімічного зв'язку та пояснювати направленість хімічного зв'язку.	Лекції, практичні заняття	Захист модульних контрольних робіт; перевірка завдань самостійної роботи.	10
2.5 Користуватися методом молекулярних орбіталей для малих молекул	Лекції, практичні заняття	Захист модульних контрольних робіт; перевірка завдань самостійної роботи.	30
3.1 Здатність обговорювати з викладачем та колегами питання, що виникають в ході захисту результатів модульних контрольних робіт	Лекції, практичні заняття, модульні контрольні роботи	Захист модульних контрольних робіт; перевірка завдань самостійної роботи.	10

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	1.1	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	3.1
	Програмні результати навчання						
P02. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.	+				+	+	+
P05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.	+	+	+	+	+	+	+
P07. Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.	+	+		+	+	+	+
P15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.	+	+		+	+	+	
P16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.	+	+	+	+	+	+	
P18. Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.	+	+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

Оцінка складається з суми балів отриманих на практичних заняттях та за модульні контрольні роботи.

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання

Модульні контрольні роботи (МКР)

Індивідуальна робота (ІР): Усні відповіді на практичних заняттях, доповнення, співбесіди за МКР.

1. Контрольна робота №1: РН 1.1 – **10/6 балів**.
2. Контрольна робота №2: РН 2.1 - 2.3 , РН 3.1– **26/14 балів**.
3. Контрольна робота №3: РН 2.4 - 2.5, РН 3.1 – **20/12 балів**.

Модульні контрольні роботи ЗМ2 та ЗМ3 складаються з 3-х частин: мінімального базового набору задач (питань) однакових для всіх студентів, практичних задач
задачі на розкриття/розуміння теорії або питання з теорії.

Модульні контрольні роботи ЗМ2 та ЗМ3 включають співбесіду щодо задачі на розкриття/розуміння теорії (або питання з теорії) та передбачає питання щодо цієї задачі або теоретичного питання, а також додаткові питання на розуміння теоретичного матеріалу. Перелік теоретичних питань за модулями наведено нижче в кінці цієї програми.

Обов'язковим для отримання заліку є написання **трьох** модульних контрольних.

Особливі умови:

В контрольних роботах модуль 2 та 3 необхідно розв'язати мінімальний базовий набір задач (питань).

	ЗМ1		ЗМ2		ЗМ3	
	<i>Min. – 6 балів</i>	<i>Max. – 10 балів</i>	<i>Min. – 30 балів</i>	<i>Max. – 50 балів</i>	<i>Min. – 24 бали</i>	<i>Max. – 40 балів</i>
Усна відповідь (практичні заняття)	1	2	16	24	12	20
Доповнення			3	8	3	5
Модульна контрольна робота 1	5	8				
Модульна контрольна робота 2			11	18		
Модульна контрольна робота 3					9	15

Студенти, які набрали сумарно меншу кількість балів, ніж критично-розрахунковий мінімум **60** балів, для одержання заліку обов'язково мають перескласти модульні контрольні роботи.

7.2. Організація оцінювання:

1. Контрольна робота №1: не раніше 2 тижню семестру;
2. Контрольна робота №2: через 7 тижнів
3. Контрольна робота №3: в кінці семестру, не пізніше ніж за тиждень до завершення семестру.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Зараховано/ Passed	60-100
Не зараховано/ Fail	0-59

**8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ**

№	Назва лекції	Кількість годин		
		лекції	практичні	сам. робота
Змістовий модуль 1. Математична база квантової хімії				
1	ТЕМА 1. Математичні основи апарату квантової механіки	2	2	7
	Диференційне та інтегральне числення. Основні властивості похідних, диференціалів та інтегралів. Повний диференціал та часткові похідні. Комплексні числа: 3 форми (алгебраїчна, тригонометрична, експоненціальна). Перехід між формами. Додавання, віднімання, множення. Формула Ейлера. Векторна та лінійна алгебра. Декартова та сферична системи координат.	1	1	4
	Оператори. Вигляд операторів ∇ , ∇^2 в декартовій та сферичних системах координат. Оператори фізичних величин. Хвильова функція. Основні властивості хвильової функції, її імовірнісна інтерпретація. Принцип суперпозиції. Лінійні самоспряжені (ермітові) оператори і їх властивості. Оператори координат, імпульсів, кутового моменту і його компонент, квадрат кутового моменту, оператори потенціальної енергії та гамільтона.	1	1	3
	Модульна контрольна робота	1		
Змістовий модуль 2. Квантова хімія атома				
2	ТЕМА 2. Основні постулати квантової механіки. Апарат квантової механіки.	4	4	7
	Хвильова функція. Основні властивості хвильової функції, її імовірнісна інтерпретація. Електронна густина. Задача на власні значення. Виродження. Матричне подання операторів. Співвідношення де-Бройля.	1	1	2
	Рівняння Шредінгера. Співвідношення невизначеностей Гайзенберга.	1	1	2
	Розв'язок рівняння Шредінгера для: частинки у потенціальному ящику, проходження крізь потенціальний бар'єр, осцилятор.	1	1	1
	Розв'язок рівняння Шредінгера для: руху по колу в площині (плаского ротатора), руху по поверхні сфери (просторовий ротатор).	1	1	2
3	ТЕМА 3. Будова атома. Одноелектронна система.	4	6	8
	Розв'язок рівняння Шредінгера для одноелектронної системи - атома Гідрогену: квантові числа, хвильові функції (атомні орбіталі), енергетичні стани.	2	3	4
	Аналіз кутових і радіальних частин атомних орбіталей. Розрахунок середніх значень фізичної величини. Повні хвильові функції. Спін електрона. Виродження.	2	3	4
4	ТЕМА 4. Будова атома. Двоелектронна система.	4	2	6
	Атом гелію. Наближені методи розв'язку рівняння Шредінгера для багаточастинкових систем. Теорія збурень.	2	1	3

	Метод самоузгодженого поля Хартрі. Кореляція руху електронів. Збуджені стани атома гелію, обмінне виродження. Принцип Паулі.	2	1	3
5	ТЕМА 5. Будова атома. Багатоелектронна система.	2	2	4
	Будова багатоелектронних атомів. Заборона Паулі. Електронна конфігурація атомів. Терми в атомах. Векторні моделі будови атомів. Зв'язок Рассела-Саундерса (L-S зв'язок). Системи термів і електронні спектри атомів. Спін-орбітальна взаємодія і тонка структура спектрів атомів. Основний терм атома, іона. Правила Гунда. Періодична система елементів. Енергія іонізації, спорідненість до електрона, електронегативність.	2	2	4
	Модульна контрольна робота	1		
Змістовий модуль 3. Квантова хімія молекули				
6	ТЕМА 6. Двохатомні молекули.	7	4	14
	Молекулярний іон водню: молекулярні орбіталі, енергія. МО-ЛКАО.	1	1	4
	Двохатомні молекули в методі МО: молекулярні конфігурації, σ -, π -, δ - зв'язки; схема МО; взаємодія конфігурацій однакової симетрії; молекулярні терми двохатомних молекул; порядок зв'язку і основний терм (стан); гетероядерні молекули.	2	1	3
	Молекула водню (ковалентний зв'язок). Метод валентних зв'язків (ВЗ). Насичуваність ковалентного зв'язку. Гетероядерні молекули в методі ВЗ.	2	1	4
	Порівняння методів ВЗ та МО. Двохелектронна хвильова функція молекули водню. Метод конфігураційної взаємодії, проблема дисоціації молекули водню в методі МО, кореляція руху електронів.	2	1	3
7	ТЕМА 7. Багатоатомні молекули.	2	10	16
	Багатоатомні молекули з локалізованими зв'язками: Валентність. Донорно-акцепторний зв'язок. Просторова будова молекул. Гібридні орбіталі. МО в молекулах AB_n . Локалізовані молекулярні орбіталі. Багатоатомні молекули з кратними зв'язками.	2	10	16
	Модульна контрольна робота	1		
	УСЬОГО	28	30	62

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:

Лекцій – **28 год.**

Практичні – **30 год.**

Самостійна робота – **62 год.**

Рекомендована література

Основна:

1. Яцимирський В.К., Яцимирський А.В. Квантова хімія. – К.: ВПЦ “Київський університет”, 2009. – 479 с.
2. Hargittai V.I., Hargittai M. Symmetry through the Eyes of a Chemist. – Weinheim. VCH Verlagsgesellschaft, 1986. – 448 p.
3. Murrell J. N., Kettle S. F. A., Tedder J. M. Valence Theory. – London–New York– Sydney: John Wiley and Sons, 1965. – 416 p.

Додаткова:

4. Atkins P., de Paula J. Atkins' Physical Chemistry. 8th Edition. – New York: W. H. Freeman and Company, 2006. – 1072 p.
5. Hochstrasser R. M. Molecular Aspects of Symmetry. New York: published by W. A. Benjamin, 1966. – 355 p.
6. Slater J.C. Quantum Theory of Molecules and Solids. Volume 1. Electronic Structure of Molecules. – New York: McGraw-Hill Book Co., 1963. – 485 p.
7. Pearson R. G. Symmetry Rules for Chemical Reactions: Orbital Topology and Elementary Processes. – Wiley, 1976. – 548 p.
8. Kittel C. Introduction to solid state physics. 8th ed. – New York: J.Wiley&Sons, 2005. – 680 p.