

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА  
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
Кафедра фізичної хімії**

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник декана  
з навчальної роботи



Наталія УСЕНКО

06 2024 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
ВИБРАНІ РОЗДІЛИ ТЕОРЕТИЧНОЇ ХІМІЇ**

**для здобувачів освіти**

галузь знань  
спеціальність  
освітній рівень  
освітня програма  
вид дисципліни

**10 Природничі науки  
102 Хімія  
магістр  
Хімія  
вибіркова**

Форма навчання	<b>заочна</b>
Навчальний рік	<b>2024/2025</b>
Семестр	<u>2</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>4</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<b>українська</b>
Форма заключного контролю	<b>залік</b>

Викладачі: доцент Яцимирський А.В.  
професор Роїк О.С.

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.  
а 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**КИЇВ – 2024**

Розробники:

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

Роїк Олександр Сергійович, д.х.н., професор, професор кафедри фізичної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри фізичної хімії

 Олександр РОЇК

Протокол № 8 від «11» травня 2024 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від «9» квітня 2024 року № 9

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

«9» квітня 2024 року

**1. Мета дисципліни** – ознайомити студентів з методами квантової хімії та нерівноважної термодинаміки, які використовуються при розрахунках фізичних властивостей системи, термодинаміки та кінетики хімічних реакцій. Формування теоретичного підґрунтя для розуміння сучасних квантово-хімічних методів моделювання та процесів самоорганізації в хімічних системах.

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:**

Студенти повинні знати вищу математику, фізику, основи квантової хімії та фізичної хімії, вміти застосовувати знання вищої математики, фізики, квантової та фізичної хімії для аналізу та опису хімічних систем, володіти елементарними навичками диференціального та інтегрального числення.

**3. Анотація навчальної дисципліни:** Розглядаються теоретичні засади базових сучасних методів квантово-хімічних розрахунків та теоретичні основи нерівноважної термодинаміки. Студенти знайомляться з методологічною основою сучасних програмних пакетів, які використовуються для квантово-хімічного моделювання хімічних систем, а також для лінійного аналізу стійкості складних хімічних реакцій. Розглядається роль процесів самоорганізації в автоколивальних хімічних процесах, хімії матеріалів та біологічних системах.

**4. Завдання (навчальні цілі):**

Надати необхідний теоретичний базис для розуміння процесів самоорганізації при нерівноважних умовах. Підготувати студентів до роботи з пакетами програм, що використовуються для квантово-хімічних розрахунків та оцінки стійкості складних хімічних процесів. Навчити студентів інтерпретувати дані, отримані за допомогою квантово-хімічних розрахунків та методів нерівноважної термодинаміки.

Навчальна дисципліна спрямована на досягнення фахової компетентності випускника ФК8.5.

**5. Результати навчання за дисципліною:**

Результати навчання (1 – знати; 2 – вміти)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1. Знання основних характеристик методу Хартрі-Фока та його обмеження.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	12
1.2. Знання основних принципів кореляційного методу конфігураційної взаємодії та багаточастинкової теорії збурень.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	12
1.3. Знання про теоретичні основи теорії функціонала густини.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	12
1.4. Знати застосування	Лекція,	Контрольна робота (питання з	12

теоретичних основ лінійної нерівноважної термодинаміки для опису фізико-хімічних процесів	самостійне опрацювання рекомендованої літератури	відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	
1.5. Знати про теоретичні основи самоорганізації у хімічних процесах, хімії матеріалів та біологічних системах	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	12
2.1. Використовувати набуті знання та вміння для квантово-хімічних розрахунків за допомогою варіаційного принципу та методу невизначених множників Лагранжа.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); перевірка завдань самостійної роботи.	20
2.2. Застосовувати лінійний аналіз стійкості для аналізу автоколивальних хімічних процесів	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); перевірка завдань самостійної роботи.	20

## 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни							
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	2.1	2.2	
ПРН13.5. Використовувати набуті знання та вміння для формування нових гіпотез на основі експериментальних даних та моделювання термодинамічних та кінетичних даних.	+	+	+	+	+	+	+	

## 7. Схема формування оцінки

### 7.1. Форми оцінювання студентів:

#### Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **100 балів /60 балів**, а саме:

1. Контрольна робота №1: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 2.1 – **20/12 балів**.
2. Контрольна робота №2: РН 1.4, РН 1.5, РН 2.2 – **20/12 балів**.
2. Усна доповідь з презентацією: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4, РН 1.5 – **15/8 балів**.
3. Реферат: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4, РН 1.5 – **15/8 балів**
4. Оцінювання самостійної роботи: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4, РН 1.5, РН 2.1, РН 2.2 – **30/20 балів**.

Залік виставляється за результатами роботи студента впродовж усього семестру і не

передбачає додаткових заходів оцінювання для успішних студентів.

### **7.2. Організація оцінювання:**

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше **4 тижня** семестру;

Контрольна робота №2: не раніше **8 тижня** семестру;

Усна доповідь з презентацією та написання реферату виконується протягом семестру, але не пізніше, ніж за **2 тижні** перед його закінчення;

Персональні завдання для написання реферату та усної доповіді з презентацією студенти отримують не пізніше, як за **8 тижнів** до закінчення семестру;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

### **7.3. Шкала відповідності оцінок**

<b>Зараховано / Passed</b>	60-100
<b>Не зараховано / Fail</b>	0-59

## 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій

№ лекції	Назва лекцій	Кількість годин	
		лекції	Самостійна робота
<b>Частина I " Методи квантової хімії "</b>			
1	Молекулярні орбіталі, енергія молекулярного іону водню, багатоелектронна функції, молекула водню.	1	4
2	Енергія багатоелектронної функції - детермінанта Слетера. Рівняння Хартрі-Фока.		4
3	Теорема Купманса. Рівняння Рутана.		5
4	Розширений метод Гюккеля. Заселеності за Малікеном. Варіаційний метод. Метод Рітца (прямий варіаційний метод). Метод конфігураційної взаємодії. (CI). Теорема Брилюена.	1	5
5	Проблема дисоціації молекули водню в RHF наближені та теорія конфігураційної взаємодії.		4
6	Стани $^1\Sigma_g^+$ і $^1\Sigma_g^-$ в молекулі водню. Різноманітні типи кореляції руху електронів. Енергія кореляційна.		4
7	Енергія кореляційна. Багаточастинкова теорія збурень. Мюлера-Пльосета метод.	1	4
8	Хоенберг-Кона теорема. Вираз для енергії через електронну густину. Рівняння Кона-Шама.		5
9	Вираз для енергії DFT. Приклади функціоналів, підхід до обрахунків.	1	5
<b>Частина 2 " Основи термодинаміки нерівноважних процесів "</b>			
10	Виробництво ентропії у нерівноважних процесах, функція дисипації. Концепція локальної рівноваги та межі її застосування. Лінійна область нерівноважної термодинаміки. Лінійні феноменологічні закони.	1	4
11	Співвідношення взаємності Онзагера для кінетичних коефіцієнтів. Межі застосування теореми Онзагера. Вимоги симетрії при взаємодії потоків та сил (принцип Кюри-Пригожина).	1	6
12	Приклади застосування теорії Онзагера: дифузія, термодифузія (ефект Соре), термоелектричні (ефекти Зеебека, Пальтьє), термомагнітні (ефекти Холла) та термомеханічні явища. Біологічні мембрани.		6
13	Критерії еволюції для рівноважних та нерівноважних станів (лінійна область). Теорема про мінімум виробництва ентропії для стаціонарного стану, межі її застосування. Застосування принципу мінімального виробництва ентропії у хімічній кінетиці.		6
14	Стійкість стаціонарного стану у лінійні та нелінійній областях. Загальний критерій стійкості Ляпунова. Функції Ляпунова. Лінійний аналіз стійкості хімічних реакцій та приклади його застосування.	1	6
15	Дисипативні структури та явища самоорганізації. Приклади просторової, часової та просторово-часової самоорганізації. Стійкість дисипативних структур.		6
16	Прості автокаталітичні моделі хімічних реакцій: випадок двох проміжних продуктів, тримолекулярна модель (брюселятор). Біфуркація Хопфа. Вплив дифузії, біфуркація Тюрінга.	1	6

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

Лекції – 8 год.

Самостійна робота – 112 год.

## **9. Рекомендовані джерела**

### **Основні:**

1. Slater J.C. Quantum Theory of Molecules and Solids. Volume 1. Electronic Structure of Molecules. – New York: McGraw-Hill Book Co., 1963. – 485 p.
2. Jensen F. Introduction to computational chemistry. – New York: J.Wiley&Sons, 2001. – 429 p.
3. Szabo A., Ostlund N. Modern quantum chemistry. Introduction to advanced electronic theory. – Dover publ., 1989.
4. Булавін Л.А., Гаврюшенко Д.А., Сисоєв В.М. Термодинаміка: навч. посібник – Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2004. –150 с.
5. Булавін Л.А., Гаврюшенко Д.А., Сисоєв В.М. Нерівноважна термодинаміка. Ч. 1. Рівняння дифузії. – Київ: ВПЦ Київський університет, 2003. –16 с.
6. Роїк О.С., Самсоніков О.В. Введення в нерівноважну термодинаміку: навч. посібник. Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2007. – 54 с.

### **Додаткові:**

1. Яцимирський В.К., Яцимирський А.В. Квантова хімія. – К.: ВПЦ “Київський університет”, 2009. – 479 с.
2. Murrell J. N., Kettle S. F. A., Tedder J. M. Valence Theory. – London–New York– Sydney: John Wiley and Sons, 1965. – 416 p.
3. Atkins P., de Paula J. Atkins' Physical Chemistry. 8th Edition. – New York: W. H. Freeman and Company, 2006. – 1072 p.
4. Kondepudi D., Prigogine I. Modern Thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures, 2nd Edition. – New York: Wiley, 2014. – 560 p