

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДВНЗ «ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА»**

Факультет природничих наук

Кафедра хімії

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Основи квантової хімії

Освітня програма Хімія

Спеціальність 102-Хімія

Галузь знань 10 Природничі науки

Затверджено на засіданні кафедри
Протокол № 1 від “28” серпня 2019 р.

м. Івано-Франківськ - 2019

ЗМІСТ

1. Загальна інформація
2. Анотація до курсу
3. Мета та цілі курсу
4. Результати навчання (компетентності)
5. Організація навчання курсу
6. Система оцінювання курсу
7. Політика курсу
8. Рекомендована література

1. Загальна інформація	
Назва дисципліни	Основи квантової хімії
Викладач (-і)	кандидат технічних наук Хацевич Ольга Мирославівна
Контактний телефон викладача	0682340835
E-mail викладача	Khatsevich.olga@meta.ua
Формат дисципліни	Семестровий
Обсяг дисципліни	3 кредити
Посилання на сайт дистанційного навчання	http://www.d-learn.pu.if.ua/
Консультації	щотижня
2. Анотація до курсу	
<p>Дисципліна «Основи квантової хімії» належить до переліку нормативних навчальних дисциплін за освітнім рівнем «бакалавр», що пропонуються в рамках циклу професійної підготовки студентів за освітньою програмою «Хімія» на другому році навчання. Вона забезпечує формування у студентів науково-дослідницької професійно-орієнтованої компетентності та спрямована на засвоєння теоретичних і практичних знань та навичок, отриманих на першому курсі з основних тем дотичних до загальної та неорганічної хімії, будови речовини.</p>	
3. Мета та цілі курсу	
<p>Сучасні уявлення про будову атомів, молекул та речовин ґрунтуються на квантовій теорії, основна ідея якої полягає в корпускулярно-хвильовому дуалізмі матерії. Відповідно до такої ідеї матерія може проявляти властивості як частинок (корпускул), так і хвиль. Дисципліна «Основи квантової хімії» подана як безперервний шлях від класичної механіки, що описує рух частинок, до сучасних квантово-хімічних методів розрахунку властивостей молекул.</p> <p>Мета навчальної дисципліни „Основи квантової хімії” забезпечити можливість ознайомлення з основами квантової механіки, диференціальними рівняннями, операторами, квантовою картиною матерії, рівнянням Шредінгера, його розв’язками, квантово-хімічними підходами до опису будови і властивостей атомів та молекул. Передбачається сформулювати уявлення про сучасні теоретичні методи, якими вивчають будову простих та складних речовин, зокрема електронну будову атомів, молекул, йонів, вільних радикалів, а також сформулювати вміння розраховувати електронну будову атомно-молекулярних систем з використанням сучасних квантово-хімічних розрахунків та інформаційних технологій.</p> <p>У результаті вивчення даного курсу студент повинен</p> <p>знати: основні закони будови речовини, закони квантової механіки, моделі атома, постулати Бора, спектр атома водню за Бором, корпускулярно-хвильовий дуалізм речовини, деякі властивості хвиль де Бройля, співвідношення невизначеностей, хвильову функцію і її властивості, рівняння Шредінгера для стаціонарних станів, спин електрона, принцип Паулі, квантові числа, електронну будову і властивості елементів періодичної системи та квантово-механічне пояснення основних типів хімічного зв’язку; X-променеві спектри, комбінаційне розсіювання світла, поглинання, спонтанне і вимушене випромінювання, лазери, елементи фізики твердого тіла.</p> <p>вміти: застосовувати теоретичні основи квантової хімії у навчальному процесі, робити теоретичні узагальнення та вказувати практичні застосування; застосувати отримані знання для розв’язування задач, проводити опис і розрахунки електронної будови молекул та інтерпретувати результати розрахунків з хімічної точки зору, творчо підійти до вибору методу розрахунку, використати набуті знання при вивченні інших дисциплін, а також для практичних цілей на хімічному виробництві, науково-дослідницькій роботі або в інших сферах діяльності; самостійно працювати з літературними джерелами.</p>	

4. Результати навчання (компетентності)

Компетенції соціально-особистісні:

- наполегливість у досягненні мети
- толерантність до різних ідей;
- креативність, здатність до системного аналітичного мислення;
- здатність до навчання теорії і практики.

Інструментальні компетенції:

- навички управління інформацією.

Професійні компетенції:

- здатність до критичного аналізу та оцінки сучасних наукових досягнень;
- здатність генерувати нові ідеї при вирішенні дослідницьких і практичних завдань;
- здатність до застосування знань для вирішення завдань якісного і кількісного характеру;
- здатність пропонувати та обґрунтовувати гіпотези на основі теоретико-методологічного аналізу;
- здатність застосовувати комп'ютерні технології та програми для проведення дослідження та аналізу отриманих даних.

5. Організація навчання курсу

Обсяг курсу

Вид заняття	Загальна кількість годин
лекції	18
семінарські заняття / практичні / лабораторні	12
самостійна робота	60

Ознаки курсу

Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний / вибірковий
I	Середня освіта (за предметними спеціалізаціями)	II	нормативна

Тематика курсу

Тема, план	Форма заняття	Література	Завдання, год.	Вага оцінки	Термін виконання
------------	---------------	------------	----------------	-------------	------------------

Вступ. Елементи теорії будови речовини

Тема 1. Елементарні частинки та основні взаємодії у Всесвіті.	Лекція	1, 2	2 год.	2	Згідно розкладу
Тема 2. Будова атомних ядер та їх загальна характеристика. Виникнення і поширеність хімічних елементів у Всесвіті.	Самостійна робота	1, 2	4 год.	2	Згідно розкладу
Тема 3. Класична електростатична теорія будови малих молекул.	Практичне заняття	1, 6	Тестові завдання, 4 год.	2	Згідно розкладу

Змістовий модуль 1. Методи розв'язку рівняння Шредінгера для атомів і молекул

Тема 4. Основні постулати квантової механіки. Оператори фізичних величин. Рівняння Шредінгера.	Лекція/ Практичне заняття	1-3	Тестові завдання 6 год.	2	Згідно розкладу
Тема 5. Модельні	Лекція	1, 2, 3	Розв'язування	2	Згідно

квантово-механічні задачі.			задач 6 год.		розкладу
Тема 6. Квантування кутового моменту.	Лекція	1,2,3	Тестові завдання 6 год	2	Згідно розкладу
Тема 7. Атом Гідрогену. Атомні орбіталі. Поняття про спін електрона.	Лекція	1, 2, 4	Розв'язування задач 6 год.	2	Згідно розкладу
Тема 8. Хвильова функція багатоелектронної системи.	Лекція	1-3, 6	6 год.	2	Згідно розкладу
Тема 9. Атомні терми. Спін-орбітальна взаємодія.	Лекція/ Практичне заняття	2, 3, 6	Розв'язування задач 6 год.	Контрольна робота 10	Згідно розкладу
Змістовий модуль 2					
Характеристика основних квантово-хімічних наближень					
Тема 10. Методи ССП МО ЛКАО Хартрі-Фока-Рутаана.	Лекція	1-6	6 год.	2	Згідно розкладу
Тема 11. Наближені методи розв'язку рівняння Шредінгера.	Лекція	1-3, 6	4 год.	2	Згідно розкладу
Тема 12. Базисні набори атомних орбіталей.	Практичне заняття	1, 2, 3, 6	Розв'язування задач 6 год.	2	Згідно розкладу
Тема 13. Метод молекулярних орбіталей для багатоатомних молекул. Молекулярний Гідроген.	Лекція	2, 3, 6	Розв'язування задач 4 год.	2	Згідно розкладу
Змістовий модуль 3					
Будова і властивості атомів та утворених ними хімічних сполук. Міжмолекулярні зв'язки					
Тема 14. Квантово-хімічне трактування періодичної системи	Практичне заняття	3-6	6 год.	Контрольна робота 10	Згідно розкладу
Тема 15. Типи хімічного зв'язку.	Лекція/ Практичне заняття	1, 4-6	Розв'язування задач 5 год.	2	Згідно розкладу
Тема 16. Простий метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул.	Лекція	2-6	5 год.	2	Згідно розкладу
Тема 17. Сучасні уявлення про молекулярну структуру речовин.	Лекція	2, 4,9 5	Тестові завдання 8 год.	2	Згідно розкладу
Підсумковий контроль (екзамен)				50	
6. Система оцінювання курсу					
Загальна система оцінювання курсу		Поточний контроль здійснюється під час лекцій та проведення практичних занять і має на меті перевірку			

	<p>знань студентів з окремих тем навчальної дисципліни та рівня їх підготовленості до виконання конкретної роботи. Оцінки у національній шкалі («відмінно» - 5, «добре» - 4, «задовільно» - 3, «незадовільно» - 2), отримані студентами, виставляються у журналах обліку відвідування та успішності академічної групи.</p> <p>Модульний контроль (сума балів за окремий змістовий модуль) проводиться (виставляється) на підставі оцінювання результатів знань студентів після вивчення матеріалу з логічно завершеної частини дисципліни – змістового модуля як сума оцінок за допуск, проведення та захист лабораторних робіт .</p> <p>Завданням модульного контролю є перевірка розуміння та засвоєння певного матеріалу (теми), вироблення навичок проведення лабораторних робіт, вміння вирішувати конкретні ситуативні задачі, здатності осмислювати зміст даної частини дисципліни, уміння публічно чи письмово подати певний матеріал.</p> <p>Семестровий (підсумковий) контроль проводиться у формі екзамену з врахуванням оцінок отриманих за два модулі.</p> <p><i>Екзамен</i> – форма підсумкового контролю, яка передбачає перевірку розуміння студентом теоретичного та практичного програмного матеріалу з усієї дисципліни, здатності творчо використовувати здобуті знання та вміння, формувати власне ставлення до певної проблеми.</p>
Вимоги до письмової роботи	-
Семінарські заняття	-
Умови допуску до підсумкового контролю	<p>Студент допускається до складання екзамену, якщо впродовж семестру він за змістові модулі набрав сумарно 25 балів і вище. Студент не допускається до складання екзамену, якщо впродовж семестру він за змістові модулі набрав менше 25 балів. У цьому випадку студенту у відомості робиться запис «не допущений» і виставляється набрана кількість балів. Допускається, як виняток, з дозволу декана факультету за заявою, погодженою з відповідною кафедрою, одноразове виконання студентом додаткових видів робіт з навчальної дисципліни (відпрацювання пропущених занять, перекладання змістових модулів, виконання індивідуальних завдань тощо) для підвищення оцінок за змістові модулі. Напередодні екзамену викладач подає доповідну декану про недопуск студентів академічної групи (груп). Відмітка про недопуск у відомості робиться при наявності розпорядження декана.</p>
7. Політика курсу	
<p>Для кращого засвоєння навчальної дисципліни на заняттях рекомендується використовувати сучасні навчально-контролюючі комп'ютерні технології, навчальний і контролюючий дидактичний матеріал, лабораторний експеримент. Посилення практичної спрямованості навчального процесу вимагає підвищення уваги до формування експериментально-практичних умінь і навичок.</p> <p>Протягом семестру для перевірки знань студентів та контролю за самостійною роботою студента застосовують домашні контрольні роботи, письмові роботи, написання реферату.</p>	

Кожен викладач ставить студентам систему вимог та правил поведінки студентів на заняттях, доводить до їх відома методичні рекомендації щодо виконання контрольних робіт, тестових завдань. Все це гарантує високу ефективність навчального процесу і є обов'язковою для студентів.

8. Рекомендована література

Базова

1. Слета Л.А., Иванов В.В. Квантовая химия. – Харьков: Фолио, 2007. - 476 с.
2. Боженко К.В. Основы квантовой химии. - М.: Российский университет дружбы народов, 2010.- 128 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «Києво-Могилянська академія», 2009. -458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини: Навчально-методичний посібник. – Івано-Франківськ: ВДВ ЦІТ Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника, 2007. - 162 с.
5. Черановський В.О., Іванова К.Ф. Основи будови речовини. Навчальний посібник для студентів хімічного факультету – Харків: ХНУ, 2003. -121 с.
6. Юхновський І.Р. Основи квантової механіки. - К.: Либідь, 1995– 352 с.

Допоміжна

1. Харгитаи И., Харгитаи М. Симметрия глазами химика. - М.: Мир, 1989.- 494 с.
2. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. -М.: Мир,1983.- 396 с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М Квантовая механика. Часть III. -М.: Наука, 1975. – 767 с.
4. Кларк Т. Компьютерная химия. - М.: Мир, 1990.- 381 с.
5. Давыдов А.С. Квантовая механика. – М.: Наука, 1973. – 704 с.
6. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. - 4-те вид., доп.- Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. - 872 с.

Викладач _____ Хацевич О.М.