

Державний вищий навчальний заклад  
«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»  
Кафедра теоретичної та прикладної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”  
Проректор \_\_\_\_\_ Шарин С.В.  
“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2017 р.

## РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

### Основи квантової хімії

(шифр і назва навчальної дисципліни)

спеціальність \_\_\_\_\_ **102 - Хімія** \_\_\_\_\_  
(шифр і назва спеціальності)

спеціалізація \_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_  
(назва спеціалізації)

інститут, факультет \_\_\_\_\_ **Факультет природничих наук** \_\_\_\_\_  
(назва інституту, факультету)

Івано-Франківськ – 2017 рік

Робоча програма навчальної дисципліни «**Основи квантової хімії**» для студентів спеціальності 102 Хімія. „\_\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2017 р. – 16 с.

Розробник:

Хацевич Ольга Мирославівна, к.т.н., доцент кафедри теоретичної та прикладної хімії;

Курта Сергій Андрійович, д.т.н., професор кафедри теоретичної та прикладної хімії.

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри теоретичної та прикладної хімії факультету природничих наук

Протокол від “30” серпня 2017 р. № 1

Завідувач кафедри теоретичної та прикладної хімії

\_\_\_\_\_ (Миронюк І.Ф.)  
(підпис)

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2017 р.

Схвалено методичною комісією факультету природничих наук

Протокол від “26” вересня 2017 р № 1

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2017 р.

Голова \_\_\_\_\_ (Шпарик Ю.С.)  
(підпис)

## 1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів ЄКТС – 3	Галузь знань <i>10 – Природничі науки</i> (шифр і назва)	<i>Нормативна</i>	
Модулів – 2	Спеціальність (професійне спрямування): <i>102 Хімія</i>	<b>Рік підготовки:</b>	
Змістових модулів – 3		2-ий	2-ий
Індивідуальне науково-дослідне завдання <i>Не передбачено</i>		<b>Семестр</b>	
Загальна кількість годин - <b>90</b>		<u>III</u>	<u>III</u>
		<b>Лекції</b>	
Тижневих годин для денної форми навчання:  аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 4	Освітньо-кваліфікаційний рівень: <i>бакалавр</i>	20 год.	
		<b>Практичні, семінарські</b>	
		10 год.	-
		<b>Лабораторні</b>	
		-	-
		<b>Самостійна робота</b>	
		60 год.	
	<b>Індивідуальні завдання:</b> не передбачено		
	Вид контролю: попередній, поточний, підсумковий контроль <i>(екзамен)</i>		

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи становить:

для денної форми навчання – 33,3 % : 66,7 %.

## 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

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.

### Мета дисципліни

Робочою програмою навчальної дисципліни «Основи квантової хімії» забезпечується можливість ознайомлення з основами класичної механіки, диференціальними рівняннями, операторами, квантовою картиною матерії, рівнянням Шредінгера, його розв'язками, квантово-хімічними підходами до опису будови і властивостей атомів та молекул. Передбачається сформувані уявлення про сучасні теоретичні методи, якими вивчають будову простих та складних речовин, зокрема електронну будову атомів, молекул, йонів, вільних радикалів, а також сформувані вміння розраховувати електронну будову атомно-молекулярних систем з використанням сучасних квантово-хімічних розрахунків та інформаційних технологій.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

### знати:

- ✓ закони (постулати) квантової механіки;
- ✓ постулати Бора, спектр атома водню за Бором;
- ✓ поняття корпускулярно-хвильового дуалізму речовини; властивості хвиль де Бройля;
- ✓ співвідношення невизначеностей, способи вираження;
- ✓ хвильову функцію та її властивості;
- ✓ рівняння Шредінгера для стаціонарних станів;
- ✓ поняття про квантові числа, спин електрона, принцип Паулі,
- ✓ -електронну будову і властивості елементів періодичної системи;
- ✓ -квантово-механічне пояснення основних типів хімічного зв'язку.

### А також вміти:

- ✓ застосовувати теоретичні основи квантової хімії у навчальному процесі, робити теоретичні узагальнення та вказувати практичне застосування;
- ✓ використовувати 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, науково-дослідній роботі або в інших сферах діяльності;
- ✓ самостійно працювати з літературними джерелами.

Для кращого засвоєння навчальної дисципліни рекомендується використовувати сучасні комп'ютерні технології, навчальний і контролюючий дидактичний матеріал, експеримент.

## **Результати навчання (компетентності)**

### **Загальні компетентності (ЗК):**

ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК5. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

### **Спеціальні (фахові, предметні) компетентності (СК):**

СК1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

СК5. Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.

СК10. Здатність до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання.

СК11. Здатність формулювати етичні та соціальні проблеми, які стоять перед хімією, та здатність застосовувати етичні стандарти досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (наукова доброчесність).

### **Програмні результати навчання (ПРН):**

ПРН1. Вміти застосувати сучасні закони хімії для створення нових прогресивних технологій.

ПРН6. Вміти застосувати принципи термодинаміки, квантової механіки для опису будови і властивостей атомів, молекул та речовин.

ПРН8. Вміти визначати хімічні, фізико-хімічні, фізичні, механічні та структурні властивості сполук.

ПРН9. Вміти класифікувати сполуки, давати їм назви, обґрунтовувати їх будову, прогнозувати їх властивості.

ПРН14. Розбиратися в основних проблемах наукових та навчальних дисциплін, значимості своєї професії.

ПРН15. Використовувати знання для роботи в міждисциплінарних областях знань, нетрадиційних системах освіти, формах та типах навчання.

### 3. Програма навчальної дисципліни

#### МОДУЛЬ 1

##### Вступ. Елементи теорії будови речовини

*Тема 1. Елементарні частинки та основні взаємодії у Всесвіті.*

Адрони та лептони. Чотири типи взаємодій елементарних частинок. Кварки. Стандартна модель. Застосування елементарних частинок у фізичних методах дослідження будови речовини.

*Тема 2. Будова атомних ядер та їх загальна характеристика. Виникнення і поширеність хімічних елементів у Всесвіті.*

Загальна характеристика атомних ядер. Протони, нейтрони, ізотопи, ізобари та ізомери. Хвильові властивості матеріальних частинок. Дуалістична природа світла. Закон взаємозв'язку маси і енергії, рівняння Ейнштейна. Залежність радіуса атомного ядра від атомного числа. Дефект маси та енергія зв'язку. Основні причини появи хімічних елементів. Термоядерні реакції. Поширеність хімічних елементів у Всесвіті.

*Тема 3. Класична електростатична теорія будови малих молекул.*

Використання закону Кулона (відштовхування електронних пар) для прогнозування геометрії малих молекул. Недоліки класичного електростатичного опису хімічного зв'язку. Міра полярності молекул – дипольний момент. Електричний потенціал системи зарядів. Взаємодія двох точкових диполів на великій відстані. Орієнтаційні міжмолекулярні взаємодії. Орієнтаційна та деформаційна поляризованість молекул.

#### Змістовий модуль 1

##### Методи розв'язку рівняння Шредінгера для атомів і молекул

*Тема 4. Основні постулати квантової механіки. Оператори фізичних величин. Рівняння Шредінгера.*

Хвильова функція. Основні властивості хвильової функції, її ймовірнісна інтерпретація. Електронна густина. Принцип суперпозиції. Дужковий формалізм Дірака. Лінійні ермітові оператори, їх властивості. Задача на власні значення. Виродження.

Матричне подання операторів. Оператори координат, імпульсів, кутового моменту і його компонент. Комутаційне співвідношення для операторів фізичних величин та умови можливості їх одночасного вимірювання. Стаціонарне рівняння Шредінгера.

*Тема 5. Модельні квантово-механічні задачі. Квантовий осцилятор.*

Задача про рух електрона у прямокутній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками (одновимірний та трьохвимірний випадки). Розділення змінних для стаціонарного рівняння Шредінгера, що описує рух такого електрона. Інтерпретація квантових чисел.

Енергетичний спектр і хвильові функції осцилятора. Двохатомна молекула у наближенні гармонічного осцилятора. Діаграми коливальних рівнів і коливальний спектр двохатомних систем.

*Тема 6. Квантування кутового моменту.*

Орбітальний кутовий момент і його компоненти. Комутаційні співвідношення для компонент кутового моменту. Орбітальне та магнітне квантові числа. Власні значення оператора z-проекції кутового моменту у сферичних координатах. Власні значення квадрату кутового моменту. Загальне уявлення про сферичні гармоніки.

*Тема 7. Атом Гідрогену. Атомні орбіталі. Поняття про спін електрона.*

Розділення змінних у рівнянні Шредингера для атома Гідрогену. Радіальна і кутові хвильові функції. Квантові числа та їх інтерпретація. Радіальна функція розподілу. Атомні орбіталі, їх позначення, властивості і засоби графічного зображення.

Експерименти Штерна–Герлаха. Власний (спіновий) кутовий момент електрона і зв'язаний з ним магнітний момент. Оператори спінового кутового моменту і комутаційні співвідношення для їх компонент. Спінове та магнітне квантові числа. Спінові функції багатоелектронної системи.

*Тема 8. Хвильова функція багатоелектронної системи.*

Принцип тотожності частинок. Принцип Паулі. Антисиметричність хвильової функції. Одноелектронне наближення. Детермінанти Слейтера. Спін-орбіталі. Синглетні та триплетні хвильові функції. Бозони та ферміони.

*Тема 9. Атомні терми. Спін-орбітальна взаємодія.*

Векторна модель атома. Додавання кутових моментів у квантовій механіці, схема Рассела-Саундерса. Систематика атомних термів. Еквівалентні електрони. Мультиплетність терма. Правила Хунда. Атомні спектри. Правила відбору для електронних переходів. Вплив зовнішнього поля: зняття виродження і розщеплення спектральних ліній у магнітному та електричному полях (ефект Зеємана, ефект Штарка).

## **Змістовий модуль 2**

### **Характеристика основних квантово-хімічних наближень**

*Тема 10. Методи ССП МО ЛКАО Хартрі-Фока-Рутаана.*

Напівемпіричні та неемпіричні методи квантової хімії. Наближення Хартрі-Фока. Вираз для хартрі-фоківської енергії. Кулонівський та обмінний інтеграл, їх фізичний зміст. Орбітальні енергії та їх зв'язок з повною електронною енергією. Оператор Фока (фокіан). Рівняння Хартрі-Фока. Межі застосування методу Хартрі-Фока.

*Тема 11. Наближені методи розв'язку рівняння Шредингера.*

Наближення Борна-Опенгеймера. Варіаційний метод, варіаційна нерівність. Засоби вибору пробних функцій. Метод лінійних комбінацій Релея–Рітца. Рівняння Рутаана для знаходження варіаційних коефіцієнтів.

*Тема 12. Базисні набори атомних орбіталей.*

Орбіталі Слетера-Зенера, константа екранування. Орбіталі гаусівського типу. Валентно-розщеплені базисні набори. Способи покращення базисних наборів.

*Тема 13. Метод молекулярних орбіталей для багатоатомних молекул. Молекулярний Гідроген.*

Електронне рівняння Шредінгера для молекулярного Гідрогену. Наближення МО ЛКАО. Орбітальні енергії та орбітальні коефіцієнти. Інтеграл перекриття, залежність від між'ядерної відстані. Якісний аналіз станів двохатомних молекул. Енергетична діаграма МО. Опис властивостей двохатомних молекул.

Обчислювальна схема методу. Електронна структура лінійних та циклічних полієнів. Розподіл електронів у молекулах. Молекулярні діаграми. Кореляційна крива залежності довжини від порядку зв'язку. Правило ароматичності. Молекула бензолу. Двоатомні молекули: йон  $\text{H}_2^-$ , молекулярний йон  $\text{He}_2^-$ , молекула  $\text{He}_2$ , молекула  $\text{O}_2$ , молекула  $\text{N}_2$ .

### **Змістовий модуль 3**

#### **Будова і властивості атомів та утворених ними хімічних сполук.**

##### **Міжмолекулярні зв'язки**

*Тема 14. Квантово-хімічне трактування періодичної системи.*

Будова атомів: електронна конфігурація. Класи елементів. Закономірності зміни енергії йонізації. Вторинна періодичність. Ступінь окиснення. Атомні та йонні радіуси. Валентність. Координаційне число.. Електронна будова, властивості елементів та їх сполук у головних і побічних групах періодичної системи. Сполуки Гідрогену і Оксигену. Кислоти, основи і амфотерні сполуки.

*Тема 15. Типи хімічного зв'язку.*

Основні характеристики хімічного зв'язку (енергія, довжина, міцність, валентні кути). Йонний зв'язок, енергія. Взаємна поляризація йонів. Вплив поляризації на властивості речовин. Валентні кути. Ковалентний зв'язок. Міжмолекулярна взаємодія. Водневий зв'язок, особливості будови води. Донорно- акцепторний зв'язок. Зв'язок в електронodefіцитних молекулах Міжмолекулярні сили Ван-дер-Ваальса. Особливості хімічного зв'язку в комплексних сполуках.

*Тема 16. Простий метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул.*

Інтерпретація хімічного зв'язку у рамках методу валентних зв'язків. Порівняння методу молекулярних орбіталей і методу валентних зв'язків. Поняття про гібридизацію, гібридні зв'язки. Криві енергії молекул. Одинарні, подвійні і потрійні зв'язки в хімічних сполуках. Теорія хімічної будови А.М. Бутлерова. Структурна і просторова ізомерія. Таутомерія та енантомерія.

*Тема 17. Сучасні уявлення про молекулярну структуру речовин.*

Потенціальна енергія та енергетичні рівні. Інфрачервона спектроскопія і спектри комбінаційного розсіювання. Квантова природа коливальних спектрів в ІЧ діапазоні (двоатомні та лінійні багатоатомні молекули, молекули типу симетричної дзиги, коливально-обертальні спектри). Метали, напівпровідники та наноструктури.



## **Теми лекцій**

- Лекція 1.* Вступ в квантову хімію. Будова атомних ядер та їх характеристика.
- Лекція 2.* Основні поняття квантової механіки. Постулати квантової механіки.
- Лекція 3.* Деякі приклади розв'язків рівняння Шредінгера (модельні задачі).
- Лекція 4.* Розв'язок рівняння Шредінгера для атома Н, розділення змінних.
- Лекція 5.* Квантові числа. Поняття про атомні орбіталі.
- Лекція 6.* Властивості багатоелектронних атомів. Терми атомів.
- Лекція 7.* Варіаційний метод для опису багатоелектронних систем.
- Лекція 8.* Теорія хімічного зв'язку. Метод МО ЛКАО.
- Лекція 9.* Поняття про базисні набори атомних орбіталей. Орбіталі Слетера-Зенера.
- Лекція 10.* Типи хімічного зв'язку (йонний та ковалентний ). (1 год.)
- Лекція 11.* Міжмолекулярні сили. Водневий зв'язок. (1 год.)

## **МОДУЛЬ 2**

### **Програма практичних занять**

- Тема 1.* Розвиток уявлень про будову атома. Історія виникнення квантової хімії. Елементарні частинки, їх значення і поширення. (1 год.)
- Тема 2.* Основні постулати квантової механіки. Оператори фізичних величин. Рівняння Шредінгера. (1 год.)
- Тема 3.* Атомні орбіталі. Енергія атомних орбіталей. Спектри атомів. Властивості багатоелектронних атомів. Поняття про атомні терми. (2 год.)
- Тема 4.* Квантово-хімічне трактування періодичної системи хімічних елементів. Особливості будови електронних оболонок атомів елементів у головних і побічних групах періодичної системи. (2 год.)
- Тема 5.* Орбіталі Слетера-Зенера, розрахунок константи екранування (2 год.)
- Тема 6.* Типи хімічного зв'язку. Поняття гібридизації. Гібридні зв'язки: особливості та значення. (2 год.)

#### 4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	с.р.		л	п	лаб	інд	с.р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
<b>Модуль 1</b>												
<b>Змістовий модуль 1</b>												
Тема 1.	2		2			-						
Тема 2-3.	4		2			2						
Тема 4.	5	1	2			2						
Тема 5.	4	2				2						
Тема 6.	5					5						
Тема 7.	2					2						
Тема 8.	4	2	-			2						
Тема 9.	4	2				2						
<i>Разом за змістовим модулем 1</i>	<i>30</i>	<i>7</i>	<i>6</i>			<i>17</i>						
<b>Змістовий модуль 2</b>												
Тема 10.	7	2	-			5						
Тема 11.	7	2	-			5						
Тема 12.	9	2	2			5						
Тема 13.	7					7						
<i>Разом за змістовим модулем 2</i>	<i>30</i>	<i>6</i>	<i>2</i>			<i>22</i>						
<b>Змістовий модуль 3</b>												
Тема 14.	7		2			5						
Тема 15.	6	1				5						
Тема 16.	10	2	2			6						
Тема 17.	7	2				5						
<i>Разом за змістовим модулем 3</i>	<i>30</i>	<i>5</i>	<i>4</i>			<i>21</i>						
<b>Усього годин</b>	<b>90</b>	<b>18</b>	<b>12</b>			<b>60</b>						

### 5. Теми семінарських занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
	Не передбачені	

### 6. Теми практичних занять

#### *Денна форма навчання*

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Розвиток уявлень про будову атома. Історія виникнення квантової хімії. Елементарні частинки, їх значення і поширення.	1
2.	Основні постулати квантової механіки. Оператори фізичних величин. Рівняння Шредінгера.	1
3.	Атомні орбіталі. Енергія атомних орбіталей. Спектри атомів. Властивості багатоелектронних атомів. Поняття про атомні терми.	2
4.	Квантово-хімічне трактування періодичної системи хімічних елементів. Особливості будови електронних оболонок атомів елементів у головних і побічних групах періодичної системи.	2
5.	Орбіталі Слетера-Зенера, розрахунок константи екранування.	2
6.	Типи хімічного зв'язку. Поняття гібридизації. Гібридні зв'язки: особливості та значення.	2
	<b><i>Усього годин</i></b>	<b><i>10</i></b>

### 7. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Не передбачається	

### 8. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Основні положення теорії Бора та поняття про атомні спектри.	2
2	Обчислення дипольних моментів малих молекул. Оцінка енергії взаємодії точкових диполів.	2
3	Основні постулати квантової механіки, їх значення. Стаціонарне і нестаціонарне рівняння Шредінгера.	2

4	Стаціонарне рівняння Шредингера для модельних задач. Обчислення середніх значень оператора координати для модельних задач.	2
5	Модельна задача : одно- та тривимірні потенціальні ями.	4
6	Модельна задача для опису руху мікрочастинки в області потенціального порогу і бар'єру. Тунельний ефект.	4
7	Обчислення комутаторів операторів кутового моменту та імпульсу.	2
8	Розділення змінних в рівнянні Шредингера. Розв'язок $\Theta$ -рівняння. Поліноми Лежандра. Розв'язок $R$ -рівняння. Поліноми Лягерра.	2
9	Атомні орбіталі та радіальна функція розподілу.	2
10	Спінові функції багатоелектронної системи.	2
11	Терми Рассела-Саундерса та їх систематика. Практичні розрахунки найстійкіших термів.	2
12	Джерела похибок СУП МО ЛКАО розрахунків. Обмеженість одностерміантного опису. Складові електронної кореляції.	4
13	Поняття про варіативні методи. Метод Рітца. Метод Хартрі-Фока.	4
14	Індекс вільної валентності та розподіл зарядів на атомах у методі Хюкеля. Використання молекулярної симетрії у розрахунках методом Хюкеля.	2
15	Електронна кореляція. Проблема обчислення інтегралів міжелектронного відштовхування. Межі застосування методу Хартрі-Фока.	2
16	Інтерпретація хімічного зв'язку у рамках методу валентних зв'язків. Резонансні структури. Гібридні зв'язки.	4
17	Особливості хімічного зв'язку в комплексних сполуках. Застосування в фізико-хімічному аналізі	2
18	Потенціальна енергія та рівні енергії. Інфрачервона спектроскопія і спектри комбінаційного розсіювання. Квантова природа коливальних спектрів в ІЧ діапазоні.	2
19.	Агрегатні стани речовин. Загальна характеристика. Метали, напівпровідники та наноструктури.	2
20.	Метод конфігураційної взаємодії. Теорія збурень для молекулярного гамільтоніану. Теорія Меллера-Плессе.	2

21	Метод об'єднаних кластерів. Порівняння методів врахування кореляційної енергії.	2
22.	Густина, як основна змінна. Теорема Хоенберга і Кона. Метод Кона-Шама.	2
23.	Стационарне рівняння Шредінгера для молекули як системи електронів і ядер, що взаємодіють за законом Кулона. Загальний вигляд хвильової функції в адіабатичному наближенні. Адіабатичний потенціал та поверхня потенційної енергії (ППЕ).	2
24.	Особливі точки ППЕ та явище хімічної ізомерії. ППЕ і хімічні реакції. Вироджені стани молекул та теорема Яна-Теллера.	2
25.	Поняття симетрії в квантовій хімії. Правила збереження орбітальної симетрії.	2
	<i>Разом, год.</i>	<b>60</b>

## 9. Індивідуальні завдання

Не передбачені

## 10. Методи навчання

- інформаційно-рецептивний (словесні, наочні)
  - репродуктивний
  - частково-пошуковий (евристичний)
- Форма навчання: лекції, практичні заняття, самостійна робота.

## 11. Методи контролю

**1. Поточний контроль** знань, здійснюється у формі двох письмових контрольних робіт за матеріалами лекцій і практичних занять, проводиться на практичних заняттях з метою активізації систематичної роботи студентів.

Підсумком самостійної роботи студентів є доповіді та презентації за обраними темами.

**2.** В кінці семестру при завершенні вивчення дисципліни складається письмовий *екзамен*. Умовою допуску до екзамену є успішне проходження контролю за модульними контрольними роботами. Екзаменаційна оцінка виставляється на підставі всіх елементів контролю та письмової роботи за матеріалами програми.

Форми контролю: поточний, тематичний контроль, екзамен.

### Завдання для поточного контролю знань і умінь студентів

1. Принцип невизначеності.
2. Уявлення про хвильову функцію.
3. Оператори. Властивості операторів.
4. Оператори основних фізичних величин.
5. Комутація операторів, узагальнений вираз співвідношення невизначеностей Гейзенберга.
6. Охарактеризувати основні постулати квантової механіки. Рівняння Шредінгера.
7. Приклади розв'язування рівняння Шредінгера. Одномірний рух вільної частинки.
8. Розв'язок модельної задачі: рух частинки в одномірній потенціальній ямі.
9. Розв'язок модельної задачі: рух частинки за умови існування одномірного потенціального бар'єру.
10. Розв'язок модельної задачі: лінійний гармонічний осцилятор.
11. Розв'язок рівняння Шредінгера для атома Гідрогену. Розділення змінних.
12. Кутова функція, розв'язок  $\Phi$ -рівняння.
13. Кутова частина хвильової функції, розв'язок  $\Theta$ -рівняння.
14. Класифікація атомних орбіталей.
15. Просторова структура атомних орбіталей.
16. Квантово-механічне пояснення будови атома Гідрогену.
17. Загальне уявлення про квантові числа (головне, орбітальне, магнітне та спінове).
18. Енергія атомних орбіталей.
19. Відстань між електроном і ядром.
20. Спектри Гідрогенподібного атома. Серії Лаймана, Бальмера, Хамфрі.
21. Загальна характеристика багатоелектронних атомів. Принцип Паулі.
22. Енергетичні характеристики атома.
23. Головне квантове число. Кутові моменти атома.
24. Орбітальне квантове число.
25. Магнітне квантове число.
26. Спін електрона.
27. Багатоелектронні атоми. Варіативний принцип.
28. Варіативний метод Рітца.
29. Метод самоузгодженого поля Хартрі-Фока.
30. Визначник Слейтера. Метод Хартрі.
31. Теорія хімічного зв'язку. Метод МО ЛКАО.
32. Наближення Борна-Оппенгеймера.
33. Метод молекулярних орбіталей (МО).

34. Наближення лінійної комбінації атомних орбіталей (МО ЛКАО). Рівняння Рутаана.
35. Орбіталі Слетера-Зенера.
36. Типи хімічного зв'язку та їх інтерпретація.

### Завдання для контрольної роботи

#### Варіант-1

1. Поняття про атомну орбіталь. Класифікація атомних орбіталей.
2. Зобразіть розміщення вузлових поверхонь для стану електрона  $p_z$  і  $dz^2$ .
3. Запишіть електронну конфігурацію атомів Mn, Cu.

#### Варіант-2

1. Квантові числа, суть головного та орбітального квантових чисел.
2. Зобразіть розміщення вузлових поверхонь для стану електрона  $p_y$  і  $d_{yz}$ .
3. Запишіть електронну конфігурацію атомів Zn, Se.

#### Варіант-3

1. Запишіть правило частот Бора. Наведіть приклади спектральних серій.
2. Зобразіть розміщення вузлових поверхонь для стану електрона  $dz^2$  і  $d_{xy}$ .
3. Запишіть електронну конфігурацію атомів Th, Se.

#### Варіант-4

1. Правила Хунда для знаходження основного стану електронів у атомі.
2. Зобразіть форми електронних хмар для станів електронів у атомі  $2p_y$  і  $3d_{yz}$ .
3. Запишіть електронну конфігурацію атомів Pb, Sc.

#### Варіант-5

1. Принцип Паулі. Запишіть послідовність заповнення енергетичних рівнів.
2. Зобразіть форми електронних хмар для станів електронів у атомі  $3dz^2$  і  $3d_{xy}$ .
3. Запишіть електронну конфігурацію атомів Tc, Hf.

### Приклади типових завдань, що виносяться на екзамен

Державний вищий навчальний заклад

«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»

Освітньо-кваліфікаційний рівень бакалавра

Спеціальність Хімія Семестр III

Навчальна дисципліна Основи квантової хімії

#### ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ №

1. Поняття про оператори (оператор Лапласа та Гамільтона). Властивості операторів.
2. Принцип невизначеності Гейзенберга.
3. Визначити можливі значення орбітального моменту імпульсу  $M_l$  електрона в збудженому атомі водню, якщо енергія збудження  $\varepsilon = 12,09$  еВ.
4. Записати електронну конфігурацію і найстійкіші терми для атомів J, B.

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ І. Ф. Миронюк  
 Екзаменатор \_\_\_\_\_ О. М. Хацевич

Державний вищий навчальний заклад  
 «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»  
 Освітньо-кваліфікаційний рівень бакалавра  
 Спеціальність Хімія Семестр III  
 Навчальна дисципліна Основи квантової хімії

**ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ №**

1. Теорія хімічного зв'язку. Суть методу МО ЛКАО.
2. Загальне уявлення про квантові числа (головне, орбітальне, магнітне та спінове).
3. Знайти власне значення оператора  $(a)\hat{A} = d^2/dx^2$  і  $f = \sin(bx)$ , знаючи, що  $\hat{A}f = a$ .
4. Знайдіть ефективні заряди атомів Ag, Mo врахувавши константу екранування.

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ І. Ф. Миронюк  
 (підпис) (прізвище та ініціали)  
 Екзаменатор \_\_\_\_\_ О. М. Хацевич  
 (підпис) (прізвище та ініціали)

**12. Розподіл балів, які отримують студенти  
 Екзамен**

Поточне оцінювання та самостійна робота			Підсумкове оцінювання (екзамен)	Сума
Теми 1-14		Самостійна робота студента (реферати, презентації)	50	100
Контрольна робота -1	Контрольна робота -2	Теми 14-17		
10	10	10		
Самостійна робота (тестування)				
		20		

*Теми 1-17 – теми змістових модулів.*

**Шкала оцінювання: національна та ECTS**

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, курсового проекту (роботи), практики	для заліку
90 – 100	<b>A</b>	відмінно	зараховано
80 – 89	<b>B</b>	добре	
70 – 79	<b>C</b>		
60 – 69	<b>D</b>	задовільно	
50 – 59	<b>E</b>		
26 – 49	<b>FX</b>	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
0-25	<b>F</b>	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни



### **13. Методичне забезпечення**

1. Робоча програма дисципліни програма лекцій та практичних занять.
2. Лекції з навчальної дисципліни та мультимедійні презентації до них.
3. Завдання для практичних занять та для самостійної роботи.
4. Підручники, монографії, наукові статті в бібліотеці (обмежена кількість).
5. Питання для поточного контролю знань та екзамену.

### **14. 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: Підр. 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. Основы будови речовини. Навчальний посібник для студентів хімічного факультету – Харків: ХНУ, 2003. -121 с.
6. Юхновський І.Р. Основы квантовой механики. - 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.