

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

Факультет природничих наук

Кафедра хімії

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ОСНОВИ КВАНТОВОЇ ХІМІЇ

Освітня програма бакалавра

Спеціальність 102-Хімія

Галузь знань 10 Природничі науки

Затверджено на засіданні кафедри
Протокол № 1 від 26.01.2024 р.

м. Івано-Франківськ - 2024

ЗМІСТ

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

1. Загальна інформація	
Назва дисципліни	Основи квантової хімії
Викладач (-і)	Доктор технічних наук Курта Сергій Андрійович
Контактний телефон викладача	+380509685163
E-mail викладача	sergiykurta@pnu.edu.ua
Формат дисципліни	Лекції, практичні, самостійна робота
Обсяг дисципліни	3 кредити, 90 годин
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 пропонується для професійної підготовки студентів за освітньою програмою 102 «Хімія» на другому році навчання. Вона забезпечує формування у студентів загальних і фахових компетентностей, спрямована на засвоєння теоретичних знань та практичних навичок, щодо сучасного розуміння будови речовин.</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, рівнянням Шредінгера, його розв'язками, квантово-хімічними підходами до опису будови і властивостей атомів та молекул. Дисципліна покликана 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:</p> <ul style="list-style-type: none"> - основні закони будови речовини, - закони (постулати) квантової механіки, - моделі атома, - постулати Бора, спектр атома водню за Бором, - суть корпускулярно-хвильового дуалізму речовини, - основні властивості хвиль де Бройля, - співвідношення невизначеностей та їх математичну інтерпретацію, - поняття про хвильову функцію та її властивості, - рівняння Шредінгера для стаціонарних станів, - принцип Паулі, поняття про спин електрона; - чотири квантові числа та їх суть; - електронну будову атомів та інтерпретацію властивостей елементів періодичної системи; - квантово-механічне пояснення основних типів хімічного зв'язку; <p>вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> - застосовувати теоретичні основи квантової хімії у навчальному процесі, - робити теоретичні узагальнення про властивості атомів за їх електронною будовою; - застосувати отримані теоретичні знання для вирішення прикладних завдань аналітичного характеру; - проводити опис і розрахунки електронної будови молекул та інтерпретувати результати розрахунків з хімічної точки зору; - використати набуті знання при вивченні інших дисциплін, в лабораторній практиці, в науково-дослідницькій роботі або в інших сферах діяльності; - самостійно працювати з додатковими інформаційними та літературними джерелами. 	

4. Результати навчання (компетентності)

Загальні компетентності (ЗК)

ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК 5. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК 10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

Спеціальні (фахові) компетентності (СК)

СК 1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

СК 5. Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.

СК 10. Здатність до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання.

СК 11. Здатність формулювати етичні та соціальні проблеми, які стоять перед хімією, та здатність застосовувати етичні стандарти досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (наукова доброчесність).

Очікувані програмні результати навчання (ПРН)

ПРН5. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.

ПРН6. Розуміти періодичний закон та періодичну систему елементів, описувати, пояснювати та передбачати властивості хімічних елементів та сполук на їх основі.

ПРН7. Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.

ПРН13. Аналізувати та оцінювати дані, синтезувати нові ідеї, що стосуються хімії та її прикладних застосувань.

ПРН20. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.

ПРН24. Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.

5. Організація навчання курсу

Обсяг курсу

Вид заняття	Загальна кількість годин
Лекції	18
Практичні заняття	12
Самостійна робота	60

Ознаки курсу

Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний / вибірковий
III	102 Хімія	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 год.)	[1, 2]	Підготовка рефератів, презентацій 2 год.	5	Згідно розкладу
Тема 2. Будова атомних ядер та їх загальна характеристика. Виникнення і поширеність хімічних елементів у Всесвіті.	Самостій-на робота	[1, 2]	Підготовка доповідей, презентацій 3 год.	5	Згідно розкладу
Тема 3. Класична електростатична	Практичне заняття	[1, 6]	Тестові завдання,	5	Згідно розкладу

теорія будови малих молекул.			5 год.		
Змістовий модуль 1.					
Методи розв'язку рівняння Шредінгера для атомів і молекул.					
Тема 4. Основні постулати квантової механіки. Математичний апарат квантової механіки. Оператори фізичних величин та їх властивості. Рівняння Шредінгера.	Лекція (1 год.)/ Практичне заняття	[1-3]	Опрацювання питань лекції. Тестові завдання 5 год.	5	Згідно розкладу
Тема 5. Модельні квантово-механічні задачі. Мікročастинка в потенціальній прямокутній ямі. Рух мікročастинки в області потенціального порогового бар'єру.	Лекція (1 год.)	[1, 2, 3]	Опрацювання питань лекції. Підготовка доповідей, презентацій 5 год.	5	Згідно розкладу
Тема 6. Будова атома. Розв'язок рівняння Шредінгера для гідрогенподібного атома. Типи симетрії атомних орбіталей. Енергія і розподіл електронної густини в гідрогенподібному атомі. Збуджені стани гідрогенподібного атома.	Лекція (2 год.)	[1-3]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 5 год.	5	Згідно розкладу
Тема 7. Атом Гідрогену. Атомні орбіталі. Магнітні властивості електронів у атомі. Поняття про спін електрона.	Лекція (2 год.)	[1, 2, 4]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 5 год.	5	Згідно розкладу
Тема 8. Хвильова функція багатоелектронної системи. Атомні терми. Спін-орбітальна взаємодія.	Лекція (1 год.)/ Практичне заняття	[1-3, 6]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 10 год.	Контрольна робота 10	Згідно розкладу
Змістовий модуль 2.					
Будова молекул та хімічний зв'язок.					
Тема 9. Теорія хімічного зв'язку. Розв'язання рівняння Шредінгера для молекул. Метод Гейтлера і Лондона. Валентність елементів у теорії Гейтлера-Лондона.	Лекція (2 год.)/ Практичне заняття	[1-4]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 5 год.	5	Згідно розкладу

Напрявленість валентних зв'язків. Поняття про гібридизацію атомних орбіталей.					
Тема 10. Метод молекулярних робіталей (ММО). Молекулярні орбіталі двохатомних молекул. Зв'язуючі властивості. Симетрія. Енергія. Молекулярні терми.	Лекція (2 год.)/ Практичне заняття	[1-4]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 5 год.	5	Згідно розкладу
Тема 11. Типи хімічних зв'язків. Полярність та насиченість хімічного зв'язку. Донорно-акцепторний зв'язок. Йонний зв'язок в двохатомних молекулах. Поняття про електронегативність елементів. Ненасиченість йонного зв'язку. Міжмолекулярні взаємодії. Водневий зв'язок.	Лекція (2 год.)/ Практичне заняття	[1-4]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 10 год.	Контрольна робота 10	Згідно розкладу
Змістовий модуль 3					
Характеристика основних квантово-хімічних наближень.					
Тема 10. Квантово-хімічні розрахунки будови молекул. Наближення Борна-Оппенгеймера. Хвильова функція багатоелектронної системи.	Лекція (1 год.)	[1-6]	Підготовка доповідей, презентацій, 5 год.	5	Згідно розкладу
Тема 11. Наближені методи розв'язку рівняння Шредінгера. Метод самоузгодженого поля. Рівняння Хартрі. Рівняння самоузгодженого поля Хартрі-Фока. Рівняння Хартрі-Фока-Рутаана.	Лекція (1 год.)	[1-3, 6]	Опрацювання питань лекції. Підготовка доповідей, презентацій, 5 год.	5	Згідно розкладу
Тема 12. Базисні набори атомних орбіталей. Базисні функції.	Лекція (1 год.)	[1-3, 6]	Підготовка рефератів, презентацій 5 год.	5	Згідно розкладу
Тема 13. Методи електронної кореляції. Введення різних	Лекція (1 год.)	[2, 3, 6]	Опрацювання питань лекції. Підготовка	5	Згідно розкладу

орбіта лей для електронів α і β -підсистем. Метод повної конфігураційної взаємодії. Метод обмеженої конфігураційної взаємодії.			доповідей, презентацій, 5 год.		
Тема 14. Інші підходи для квантово-хімічних розрахунків будови молекул. Основи теорії функціоналу густини. Багаточастинкова теорія збурення.	Самостійна робота	[2, 3, 6]	Підготовка доповідей, презентацій, 5 год.	Підсумкове тестування 10	Згідно розкладу
Підсумковий контроль (екзамен)				50	
6. Система оцінювання курсу					
Загальна система оцінювання курсу	<p>Поточний контроль здійснюється під час лекцій та проведення практичних занять і має на меті перевірку 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 окремих змістовий модуль) виставляється на підставі оцінювання результатів знань студентів після вивчення матеріалу з логічно завершеної частини дисципліни – змістового модуля. Завданням модульного контролю є перевірка розуміння та засвоєння певного матеріалу (теми), 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 окремі модулі. <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>				
Умови допуску до підсумкового контролю	<p>Студент допускається до складання екзамену, якщо впродовж семестру він за змістові модулі набрав сумарно 25 балів і вище. Якщо впродовж семестру за змістові модулі студент набрав менше 25 балів - студенту у відомості робиться запис «не допущений» і виставляється набрана кількість балів. Допускається, як виняток, з дозволу декана факультету за заявою, погодженою з 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.</p>				

7. Політика курсу

Для кращого засвоєння навчальної дисципліни на заняттях рекомендується використовувати сучасні навчально-контролюючі комп'ютерні технології, навчальний і контролюючий дидактичний матеріал. Посилення практичної спрямованості навчального процесу вимагає підвищення уваги до формування експериментально-практичних умінь і навичок.

Протягом семестру для перевірки знань студентів та контролю за самостійною роботою студента застосовують домашні контрольні роботи, письмові роботи, підготовка доповідей і презентацій.

На початку викладання курсу перед студентом виставляється система вимог та правил поведінки і відвідування практичних занять, доводяться до відома методичні рекомендації щодо виконання контрольних робіт, тестових завдань. Все це гарантує високу ефективність навчального процесу і є обов'язковим для успішного засвоєння програмового матеріалу даного курсу.

8. Рекомендована література

Базова

1. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «Києво-Могилянська академія», 2009. -458 с.
2. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. - 4-те вид., доп.- Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. - 872 с.
3. Черановський В.О., Іванова К.Ф. Основи будови речовини. Навчальний посібник для студентів хімічного факультету – Харків: ХНУ, 2003. -121 с.
4. Юхновський І.Р. Основи квантової механіки. - К.: Либідь, 1995– 352 с.
5. Основи квантової хімії (Навчально-методичний посібник) / [Електронний ресурс] / Курта С.А., Хацевич О.М. / Факультет природничих наук; ДВНЗ “Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника”. - Івано-Франківськ, 2018. – 235 с.

Допоміжна

1. Курта С.А. Будова речовини: Навчально-методичний посібник. – Івано-Франківськ: ВДВ ЦІТ Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника, 2007. - 162 с.

Викладач _____ **КС** _____ Курта С.А.