

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
Кафедра теоретичної хімії

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Перший проректор

\_\_\_\_\_

“\_\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

## **РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

### **Квантова хімія**

напряму підготовки 0703 хімія  
для спеціальності 8.070301 хімія

хімічного факультету  
заочна форма навчання

Кредитно-модульна система  
організації навчального процесу

Харків

Робоча програма навчальної дисципліни „Квантова хімія” для студентів за напрямом підготовки 0703 хімія, спеціальністю 8.070301 хімія.

Розробники: **Зіolkовський Дмитро Володимирович, к.х.н., ст. викл. кафедри теоретичної хімії**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри теоретичної хімії

Протокол № \_\_\_\_\_ р.

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ А. М. Жолновач

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № \_\_\_\_ від “ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Голова \_\_\_\_\_

О.І. Юрченко

### 1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
		заочна форма навчання
Кількість кредитів 3	Напрямок підготовки 0703 хімія	нормативна
Модулів – 2	Спеціальність 8.070301 хімія	Рік підготовки: 3 -й
Загальна кількість годин 162		Семестр 5 -й
Тижневих годин для з форми навчання: аудиторних – - самостійної роботи студента – -	Освітньо-кваліфікаційний рівень: бакалавр	Лекції 16 год.
		Практичні 8 год.
		Самостійна робота 138 год.
		Вид контролю: іспит

### 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: Сформувати уявлення про теоретичні методи, якими вивчають електронну будову атомів та молекул.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

**знати:** основні положення квантової теорії, модельні квантовомеханічні задачі, наближені методи розв'язання рівняння Шредінгера, метод молекулярних орбіталей, метод валентних схем.

**вміти:** обирати придатні квантово-хімічні методи для розв'язання задач, інтерпретувати та використовувати результати квантово-хімічних розрахунків..

### 3. Програма навчальної дисципліни

#### Модуль 1.

Тема 1. Становлення та розвиток квантової хімії .

Тема 2. Основні постулати квантової механіки

Тема 3. Модельні квантовомеханічні задачі

#### Модуль 2.

Тема 4. Атом водню

Тема 5. Молекулярний іон водню.

Тема 6. Метод молекулярних орбіталей Хюккеля.

Тема 7. Метод валентних зв'язків та концепція резонансу

#### 4. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин				
	Заочна форма				
	Усього	у тому числі			
л		п	лаб	сп	
1	2	3	4	5	6
<b>Модуль 1</b>					
Тема 1	22	2			20
Тема 2	23	2	2		19
Тема 3	24	2	2		20
Разом за модулем 1	69	6	4		59
<b>Модуль 2</b>					
Тема 4	22	2			20
Тема 5	21	2			19
Тема 6	24	3	2		20
Тема 7	24	3	2		20
Разом за модулем 2	93	10	4		79
<b>Усього годин</b>	162	16	8		138

#### 5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Фізичні основи квантової механіки	2
2	Атомні орбіталі	2
3	Сучасна теорія хімічного зв'язку	2
4	Електронна структура лінійних та циклічних полієнів	2

#### 6. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Основні властивості хвильової функції, її імовірнісна інтерпретація. Умова нормування. Густина імовірності розподілу частинок у просторі, електронна густина. Оператор Гамільтона (гамільтоніан). Принцип суперпозиції. Нестационарне рівняння Шредингера. Стационарне рівняння Шредингера. Дискретний і неперервний енергетичний спектри.	20
2	Електронна будова і електронні спектри поглинання супряжених лінійних та ароматичних вуглеводнів у рамках моделі "вільних електронів". Тунельний ефект. Коефіцієнт проходження та коефіцієнт віддзеркалювання. Приклади тунелювання у хімії. Енергетичний спектр і хвильові функції осцилятора. Двохатомна молекула у наближенні гармонічного осцилятора. Силова стала.	19

	Діаграми коливальних рівнів і коливальний спектр двохатомних систем.	
3	Атомні орбіталі, їх позначення, властивості і засоби графічного зображення. Експерименти Штерна–Герлаха. Власний (спіновий) кутовий момент електрона і пов'язаний з ним магнітний момент. Спінове та магнітне квантові числа.	20
4	Наближені методи розв'язку рівняння Шредингера. Варіаційний метод, варіаційна нерівність. Засоби вибору пробних функцій. Метод лінійних комбінацій Релея–Ріца. Рівняння для знаходження варіаційних коефіцієнтів	20
5	Обчислювальна схема методу. Електронна структура лінійних та циклічних полієнів. Розподілення електронів в молекулах. Формули Коулсона для електронної густини і порядку зв'язку. Індекс вільної валентності. Спінова густина. Молекулярні діаграми. Кореляційна крива залежності довжини від порядку зв'язку. Правило ароматичності. Антиароматичність. Електронна будова альтернантних вуглеводнів.	19
6	Індекси реакційної здатності: індекс вільної валентності, заряди на атомах, індекси Фукуї, енергія локалізації. Метод локалізацій Уеланда. Метод Коулсона та Лонге-Хігінса. Теорія граничних електронів Фукуї.	20
7	Інтерпретація хімічного зв'язку у рамках методу валентних зв'язків. Концепція резонансу. Резонансні структури. Розрахунок енергії зв'язку в молекулі водню. Порівняння методу молекулярних орбіталей і методу валентних зв'язків. Обчислення зарядів на атомах, порядків зв'язків, індексів вільної валентності і дипольних моментів в рамках методу валентних схем.	20

### 7. Методи навчання

Елементи проблемних лекцій; індивідуальні завдання для самостійної роботи; моделювання професійних ситуацій при вирішенні задач щодо інтерпретації спектральних даних.

### 8. Методи контролю

Усний контроль, письмові роботи, іспит.

### 9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота							Підсумковий семестровий контроль (екзамен)	Сума
Модуль 1			Модуль 2				40	100
T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7		
10	10	10	10	10	5	5		

Для зарахування кожного з модулів студент має набрати не менше, ніж 50% балів за кожною з тем. Для одержання допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен написати контрольні роботи і набрати не менше 40 балів.

### Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	<b>A</b>	зараховано
80-89	<b>B</b>	
70-79	<b>C</b>	
60-69	<b>D</b>	
50-59	<b>E</b>	
1-49	<b>FX</b>	незараховано

### 10. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Електронні конспекти лекцій.

### 11. Рекомендована література

#### Базова

1. Слета Л.А., Иванов В.В. Квантовая химия. Харьков, Фолио, 2007, 443 с.
2. Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков. М.:Высш.шк.,1980. 215 с.
3. Мелешина А.М. Курс квантовой химии. Воронеж: Изд-во Воронеж. ун-та,1981,198 с.
4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.:Высш.шк.,1979. 407с.
5. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К. Химическая связь. Киев: Вища шк., 1975. 304 с.

#### Допоміжна

1. Лузанов А.В. Теоретическая химия. т.1. Физические основы.- Харьков, ХГУ, 1991. 207 с.
2. Фларри Р. Квантовая химия. М., Мир,1985. 472 с.
3. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир,1979. 504 с.
4. Цюлик Л. Квантовая химия. т.1.М.:Мир, 1976. 512 с.
5. Слета Л.А. Химия: Справочник. – Харьков: Фолио; Ростов н/Д: Феникс,1997. 496 с., 2 -е изд. 2000. 496 с.