

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Факультет: хімічний
Кафедра фізичної та колоїдної хімії

«Затверджено»

На засіданні кафедри фізичної
та колоїдної хімії Львівського
національного університету
протокол № 1
від 31.08. 2022р.

Завідувач кафедри фізичної
та колоїдної хімії



О. РЕШЕТНЯК

СИЛАБУС З НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

«Квантова механіка та квантова хімія»

Освітньо професійна програма

«Хімія»

Першого (бакалаврського) рівня вищої освіти За спеціальністю 102-Хімія

Галузь знання 10 Природничі науки

Кваліфікація: Бакалавр хімії

Львів 2022

**Силабус курсу «Квантова механіка та квантова хімія»
2022 – 2023 навчального року**

Назва курсу	Квантова механіка та квантова хімія
Адреса викладання курсу	Вул.. Кирила і Мефодія 6 ауд. №3.
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Хімічний, кафедра фізичної та колоїдної хімії
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10. Природничі науки
Викладачі курсу	Дутка Володимир Степанович, доктор хім.. наук, доцент, професор
Контактна інформація викладачів	vdutka@ukr.net
Консультації по курсу відбуваються	щоп'ятниці, 15:00-17:50 год. (вул.. Кирила і Мефодія 6, ауд.122)
Сторінка курсу	
Інформація про курс	Курс розроблено таким чином, щоб надати учасникам необхідні знання, обов'язкові для того, щоб розуміти основні концепції квантової механіки та квантової хімії. Тому у курсі представлено як огляд концепцій, так і процесів та інструментів, які потрібні для знаходження основних параметрів молекул та їхніх електронних властивостей. .
Коротка анотація курсу	Дисципліна «Квантова механіка і квантова хімія» є нормативною дисципліною з спеціальності 102 «Хімія» для освітньої програми «Хімія», яка викладається в 7 семестрі в обсязі 5 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). В ході вивчення курсу студенти вивчають квантову механіку та квантову хімію, які є фундаментальною дисципліною, яка лежить в основі теоретичної хімії. Метою даної дисципліни є ознайомлення студентів з основами квантової механіки та застосування її законів для розв'язку хімічних проблем. В ході реалізації програми курсу студенти знайомляться з основними квантово-хімічними методами розрахунку структури, електронних параметрів, термодинамічних характеристик та ін. «Квантова механіка та квантова хімія» включає в себе основні закони квантової механіки, методи квантової хімії, методи розрахунку оптимальної геометричної структури молекул, термодинамічних параметрів, спектральних характеристик, електронних параметрів молекул. Окремий розділ становлять сучасні квантово-хімічні програми, які забезпечують розрахунок перелічених властивостей молекул.
Мета та цілі курсу	Метою вивчення курсу «Квантова механіка та квантова хімія» є ознайомлення студентів з основами квантової механіки та застосування її законів для розв'язку хімічних проблем.
Література для вивчення дисципліни	Список рекомендованої літератури 1.Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могилянська академія, 2009, с.458. 4.Вакарчук І.О. Квантова механіка. Львів. 2007. с.848. 5.Фларри Р. Квантова хімія. М.: Мир. 1985. с. 472.

	<p style="text-align: center;">Додаткова література</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Яцимирський К.Б., Яцимирський В.К. Хімічний зв'язок. К. Вища школа. 1992. с. 246. 2. Туровський М.А., Туровська О.М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Донецьк. 2004. с.131. 3. Венгер Є.Ф., Грибань В.М., Мельничук О.В. Збірник задач з квантової механіки. К. Вища школа, 2003 с. 230. 4. Мінкін В.И., Симкін Б.Я., Миняев Р.М. Теория будови молекул. М.: Вища школа. 1979, с.407. 5. Заградник Р., Поллак Р. Основи квантової хімії. М.: Мир. 1979. с.504. 6. Piela L. Idee chemii kwantowej. Warszawa. Wyd. PWN. 2006. p. 1137. 7. Frank L. Pilar. Elementary Quantum Chemistry. Nj. 1990. p.589. 8. Ю. Краснов К.С. Молекули та хімічний зв'язок. М.. 1977. с.280.
Тривалість курсу	Один семестр 150 год.
Обсяг курсу	80 годин аудиторних занять. З них 48 годин лекцій, 32 годин практичних занять та 50 годин самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>В результаті вивчення курсу студент повинен знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> - основні закони квантової хімії; - наближені методи розв'язку рівнянь Шрьодінгера; - методи квантово-хімічних розрахунків оптимальної геометричної структури, електронних характеристик молекул; - основні напівемпіричні та ab initio методи квантово-хімічних розрахунків; <p>вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> - застосовувати розрахункові методи квантової хімії; - інтерпретувати результати квантово-хімічних розрахунків; - прогнозувати електронні властивості атомів та молекул; - прогнозувати структуру молекул та іонів; - прогнозувати реакційну здатність молекул та іонів. <p>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. Здатність бути критичним і самокритичним. та спеціальних (фахових) компетентностей:</p> <p>СК1 Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії. СК4 Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії. ПР01. Розуміти ключові хімічні поняття, основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, а також хімічних технологій на рівні, достатньому для їх застосування у професійній діяльності та для забезпечення можливості в подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії. ПР02. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для</p>

	<p>досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.</p> <p>ПР03. Описувати хімічні дані у символічному вигляді.</p> <p>ПР05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.</p> <p>ПР07. Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.</p> <p>ПР16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.</p>
Ключові слова	Квантова механіка, квантова хімія, квантово-хімічні обчислення, електронна структура, геометрична будова
Формат курсу	Очний
Теми	<p>Теми лекційних занять</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Предмет квантової механіки та квантової хімії. Основні етапи в становленні квантової теорії та тенденції розвитку квантової хімії як основного теоретичного фундаменту сучасної хімії. 2. Основні постулати квантової механіки. Хвильові функції (функції стану), їх властивості. Імовірності результатів виміру фізичних величин, середнє значення. Густина імовірності, знаходження частинок в окремих точках простору. 3. Математичний апарат квантової механіки . Оператори фізичних величин та їх властивості. Ермітівські оператори, власні функції та власні значення операторів. Виродження. Матричне зображення операторів. 4. Принцип відповідності та оператори квантової механіки: координати, імпульсу, кінетичної та потенціальної енергії. Оператор Гамільтона. 5. Рівняння Шрödінгера. Приклади розв'язку рівняння Шрödінгера для простих задач: Рух вільної частинки, частинка в потенціальній ямі, лінійний гармонічний осцилятор, жорсткий ротатор. 6. Розв'язок рівняння Шрödінгера для атома водню. Розділення змінних, представлення хвильової функції. 7. Приєднаний поліном Лежандра, його властивості. Поліном Лягерра 8. Атомні орбіталі, їх радіальні та кутові складові. Атом гелію. 9. Наближені методи розв'язку квантово-механічних задач. Теорія збурень. Варіаційний принцип. Метод Рітца. Багатоелектронний атом. 10. Квантова механіка переходів між різними станами. Правила відбору. Спін-орбіталі. Детермінант Слейтера. Спін- орбітальна взаємодія 11. Наближені розв'язки хвильового рівняння. Одноелектронне наближення 12. Молекулярне рівняння Шрödінгера. Розділення електронного та ядерного рухів. Адіабатичне наближення. 13. Метод конфігураційної взаємодії. Метод валентних схем. Рівняння Гартрі. Рівняння Гартрі-Фока. 14. Метод СУП МО ЛКАО. Слейтерівські та гаусівські типи орбіталей. Теорема Купманса. Енергія іонізації. Спорідненість до електрона 15. Електронна будова атомів. Правила Хунда. Принципи побудови періодичної системи. 16. Наближені методи квантової хімії. Напівемпіричні методи. Метод орбіталей Гюккеля. Розширений метод Гюккеля. 17. Методи ПНДП, ЧНДП , ППП, МЧНДП, АМ1, РМ3. Приклади напівемпіричних методів та їх можливості. 18. Параметри електронної структури: заряди на атомах, порядки зв'язків, індекси вільної валентності, індекси реакційної здатності. Використання параметрів електронної структури для прогнозування реакційної здатності молекул. Група методів ab initio. Рівняння Ротаана. 19. Гібридизація як спосіб прогнозування просторової будови молекул, йонів та радикалів. Теорії гібридизації.

	<p>20. Квантово-хімічний опис хімічних реакцій. Поверхні потенціальної енергії.</p> <p>21. Збереження орбітальної симетрії в хімічних реакціях. Правила Вудворда Хофмана.</p> <p>22. Основні напрямки розвитку квантової хімії.</p>												
Підсумковий контроль, форма	Екзамен в кінці року, усний												
	<p>Оцінювання підготовленості студентів Колоквіуми</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>№ з/п</th> <th>Номери лекцій</th> <th>Сума балів</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>Основи квантової механіки. Основні оператори квантової механіки Рівняння Шрьодігера для різних квантово-хімічних моделей. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома водню. Типи атомних орбітолей.</td> <td>5,0</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>Основи квантової хімії. Метод Гюккеля Детермінант Слейтер . Властивості детермінанта. Кулонівський інтеграл. Рівняння Рутаана. Обмінний інтеграл. Методи розрахунку молекул.</td> <td>5,0</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>Комп'ютерні програми для озрахунку структури та електронних властивостей молекул</td> <td>5,0</td> </tr> </tbody> </table> <p>Виступи на семінарах та їхнє обговорення Кожен студент повинен підготувати та виступити на семінарі з доповіддю тривалістю до 20 хвилин. Після виступу проходить обговорення доповіді у групі. Приблизний перелік тем семінарських занять. 1.Ермітівські оператори та їх властивості. Оператори квантової механіки. 2.Власні функції та власні значення операторів. 3. Основні постулати квантової механіки. 4.Оператор кінетичної енергії. Оператор повної енергії системи. 5. Оператор Гамільтона для атомних та молекулярних задач. 6. Лінійний гармонічний осцилятор. Енергія осцилятора. 7. Жорсткий ротатор. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для жорсткого ротатора. 8. Атом водню. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома водню. 9. Тунельний ефект в хімії. 10. Атомні орбіталі. Квантові числа. 11. Поліноми Лежандра і Лягерра та їх властивості. 12.Варіаційний принцип. Приклади розв'язку квантовохімічних задач з використанням варіаційного принципу. 13. Теорія збурень. Задачі квантової механіки, які можна розв'язати з використанням теорії збурень. 14. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома гелію. 15. Теорія Гартрі. Методи побудови хвильової функції</p>	№ з/п	Номери лекцій	Сума балів	1	Основи квантової механіки. Основні оператори квантової механіки Рівняння Шрьодігера для різних квантово-хімічних моделей. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома водню. Типи атомних орбітолей.	5,0	2	Основи квантової хімії. Метод Гюккеля Детермінант Слейтер . Властивості детермінанта. Кулонівський інтеграл. Рівняння Рутаана. Обмінний інтеграл. Методи розрахунку молекул.	5,0	3	Комп'ютерні програми для озрахунку структури та електронних властивостей молекул	5,0
№ з/п	Номери лекцій	Сума балів											
1	Основи квантової механіки. Основні оператори квантової механіки Рівняння Шрьодігера для різних квантово-хімічних моделей. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома водню. Типи атомних орбітолей.	5,0											
2	Основи квантової хімії. Метод Гюккеля Детермінант Слейтер . Властивості детермінанта. Кулонівський інтеграл. Рівняння Рутаана. Обмінний інтеграл. Методи розрахунку молекул.	5,0											
3	Комп'ютерні програми для озрахунку структури та електронних властивостей молекул	5,0											

- багатоелектронного атома.
16. Метод Гартрі – Фока. Детермінант Слейтера. Розв’язок рівнянь Гартрі – Фока.
 17. Рівняння Ротаана. Розв’язок рівнянь. Загальна характеристика методів *ab initio*.
 18. Принципи побудови Періодичної системи.
 19. Молекула H_2 . Приклад розв’язку за методом валентних зв’язків. Системи кривих потенціальної енергії.
 20. Класифікація молекулярних орбіталей. Врахування симетрії при класифікації орбіталей.
 21. Гібридні та еквівалентні орбіталі. Кореляційні діаграми.
 22. Метод Гюккеля. Приклади розрахунку простих молекул.
 23. Теорія реакційної здатності органічних сполук.
 24. Збереження орбітальної симетрії в хімічних реакціях. Правила Вудворда – Хоффмана.
 25. Загальна характеристика напівемпіричних методів квантової хімії.
 26. Методи нульового диференційного перекривання.
 27. Метод повного нехтування диференціальним перекривання (ПНДП).
 28. Симетрія в квантовій хімії.
 29. Неемпіричні методи в квантовій хімії.
 30. Електронна кореляція.
 31. Розрахунок енергії зв’язку в молекулах.
 32. Багатоелектронні атоми та Періодична система елементів.
 33. Магнітний момент електрона в атомі. Спін електрона.
 34. Спін-орбітальна взаємодія. Ефекти Заємана та Штарка.
 35. Молекулярний іон водню H_2^+ .

Максимальна оцінка за виступ на семінарі складає 10 балів
 На протязі навчання студенти складають два колоквиуми.
 Максимальна оцінка за колоквиум 10 балів.

Студенти виконують три розрахункові роботи з використанням квантово-хімічних програм

№ з/п	Види розрахункових робіт			
		Зміст лабораторної	Форма звітності	Сума балів
1	Розрахунок оптимальної геометричної будови молекул	Міжядерні віддалі, плоскі та дієдральні кути	Звіт за роботу	5.0
2	Розрахунок фізико-хімічних параметрів та їх порівняння з експериментальними даними	Теплоти утворення та порівняння їх з даними NIST	Звіт за роботу	5.0
3	Робота з програмою Hyperchem	Основні характеристики програми	Звіт за роботу	5.0

Кожен студент виконує індивідуальне домашнє завдання, яке містить 14 питань теоретичних та практичних проблем.
 Після завершення курсу кожен студент складає екзамен.

	Максимальна оцінка за складання тесту 50.
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з вищої математики, фізики, фізичної хімії дисциплін, достатніх для сприйняття категоріального апарату «Квантової механіки та квантової хімії», розуміння джерел та основних закономірностей.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Словесні – лекція, пояснення, консультація, бесіда; б) наочні – ілюстрування лекційного матеріалу таблицями, схемами, графіками в) практичні – виконання індивідуальних тестових, письмових контрольних та домашніх завдань.
Необхідне обладнання	Мультимедійний проектор, ноутбук. Квантово-хімічні програми: WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR, SCHRODINGER (під час реєстрації студентів навчальна ліцензія видається безкоштовно)
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> практичні розрахункові роботи (3 пр.) 30% семестрової оцінки 15 балів, колоквиуми (3 к) 15.0 балів, виступи на семінарі 10 балів домашнє завдання 10 балів максимальна кількість балів 50. екзамен:50% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів_100 <p>Підсумкова максимальна кількість балів: 100</p> <p>Письмові роботи: Очікується, що студенти виконають декілька видів письмових робіт (есе, вирішення кейсу). Академічна доброчесність: Очікується, що роботи студентів будуть їх оригінальними дослідженнями чи міркуваннями. Відсутність посилань на використані джерела, фабрикування джерел, списування, втручання в роботу інших студентів становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної недоброчесності. Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій роботі студента є підставою для її незарахування викладачем, незалежно від масштабів плагіату чи обману. Відвідання занять є важливою складовою навчання. Очікується, що всі студенти відвідають усі лекції і практичні заняття курсу. Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття. У будь-якому випадку студенти зобов'язані дотримуватися усіх строків визначених для виконання усіх видів письмових робіт, передбачених курсом. Література. Уся література, яку студенти не зможуть знайти самостійно, буде надана викладачем виключно в освітніх цілях без права її передачі третім особам. Студенти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.</p> <p>Політика виставлення балів. Враховуються бали набрані на поточному тестуванні, самостійній роботі та бали підсумкового тестування. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час практичного заняття; недопустимість пропусків та запізнь на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях не пов'язаних з навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін.</p> <p>Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються.</p>

<p>Питання до екзамену</p>	<p>Питання до іспмту з курсу «Квантова механіка та квантова хімія»</p> <ol style="list-style-type: none"> 1.. Предмет курсу „Квантова механіка та квантова хімія” 2. Місце квантової хімії в сучасній хімії. 3. Принцип невизначеності Гайзенберга. 4. Лінійні самоспряжені оператори. Комутатор. 5. Принцип заборони Паулі. 6. Ароматичність. Правило Гюккеля. 7. Оператори координати та імпульсу, їх властивості. 8. Варіаційний принцип. 9. Ефект тунелювання та його роль в хімії. 10. Стала екранування, хвильова експонента. 11. Молекулярні діаграми та їх застосування для прогнозування реакційної здатності молекул. 12. Метод Гартрі. Переваги та недоліки методу. 13. Наближення Поппла. Класифікація наближених методів квантової хімії. 14. Метод Гартрі-Фока. 15. Постулати квантової механіки. 16. Методи самоузгодженого поля. Загальна характеристика. 17. Розширений метод Гюккеля (РМГ). Переваги та недоліки. 18. Індекс вільної валентності. 19. Поліноми Лягерра, їх властивості. 20. Загальна характеристика методу валентних зв'язків. 21. Наведіть схему розрахунку та розв'язки рівнянь для молекули етилену методом орбіталей Гюккеля. 22. Математичний апарат квантової механіки. 23. Z–матриця. Структура матриці 24. Функції базисного набору. Типи наборів. 25. Дайте характеристику наближення Маллікена для розрахунку багато- центрових орбіталей. 26. Правила Вудворда- Хоффмана. Застосування в органічній хімії. 24. Оператори та їх властивості. Оператори квантової механіки. 25. Кулонівський та обмінний інтегралі їх фізичний зміст. 26. Наведіть схему та розв'язки за методом орбіталей Гюккеля молекули бензену. 27. Терми багатоелектронних атомів. 28. Поліноми Лежандра та їх властивості. 28. Перелічіть та наведіть загальну характеристику напівемпіричних методів квантової хімії 29. Вибір функцій базисного набору. Слейтерівський та гаусівський тип орбіталей. 30. Наведіть схему розрахунку та розв'язок рівнянь за методом орбіталей Гюккеля молекули бутадієну. 31. Оператор кінетичної енергії. Власні значення оператора. 32. Параметри електронної структури: частинний електричний заряд, індекс вільної валентності, порядок зв'язку. 33. Класифікація атомних орбіталей. 34. Z– матриця. Властивості та структура матриці. 35. Оператор Гамільтона. Матричне представлення операторів. 36. Квантові числа n,l,m,s, їх походження. 37. Методи ЛКАО-МО загальна характеристика. 38. Наведіть схему та розв'язки за методом орбіталей Гюккеля для
-----------------------------------	---

- молекули формальдегіду.
39. Оператори спіну та їх властивості.
 40. Наближення Поппла. Напівемпіричні методи квантової хімії.
 41. Рівняння Шрьодінгера для простих систем.
 42. Рівняння Рутаана. Характеристика методів *ab initio*.
 43. Збереження орбітальної симетрії в хімічних реакціях.
 44. Наведіть схему розрахунку та розв'язки молекули циклобутдієну за методом орбіталей Гюккеля.
 45. Рівняння Шрьодінгера для жорсткого ротатора та лінійного гармонічного осцилятора.
 46. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для молекулярного іона водню H_2^+ .
 47. Енергія іонізації. Методи визначення енергії іонізації.
 48. Конфігураційна взаємодія.
 - 49 Рівняння Шрьодінгера для вільної частинки та його розв'язок.
 50. Наближені функції атомних орбіталей. GTO та STO типи орбіталей.
 51. Молекулярні діаграми.
 52. Дайте характеристику напівемпіричного методу ЧНДП.
 53. Рівняння Шрьодінгера для атома водню та його розв'язки.
 54. Правило Гюккеля для ароматичності.
 55. Терми багатоелектронних атомів. Терм основного стану.
 56. Дайте загальну характеристику напівемпіричного методу ПНДП.
 57. Рівняння Шрьодінгера атома водню в полярній системі координат.
 58. Правила Гунда. Визначення терму основного стану.
 59. Детермінант Слейтера. Переваги зображення хвильової функції як детермінанту.
 60. Дайте загальну характеристику напівемпіричного методу АМ-1.
 61. Атомні орбіталі. Класифікація атомних орбіталей.
 62. Наближення Борна –Опенгеймера.
 63. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома гелію.
 64. Дайте загальну характеристику напівемпіричного методу РМ-3.
 65. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для частинки в потенціальній ямі.
 66. Орбітальна енергія Гартрі-Фока. Процедура самоузгодження.
 67. Адіабатичне наближення.
 69. Порядок хімічного зв'язку. Рівняння Коулсона.
 70. Хвильові функції. Умови нормування та ортогональності.
 - 71.. Детермінант Слейтера та принцип Паулі.
 72. Молекулярні орбіталі їх походження та класифікація.
 73. Збереження орбітальної симетрії в органічних реакціях . Реакція циклізації етилену.
 - 74.Умова розділення змінних в рівнянні Шрьодінгера для атома водню.
 75. Оператор кінетичної енергії, його властивості.
 76. Параметри електронної структури та їх застосування в хімії.
 77. Напівемпіричні методи квантової хімії.
 78. Рівняння Рутаана. Матриця порядку зв'язків.
 79. Теорема Купманса. Енергія іонізації.
 80. Векторна модель атома. Системи термів.

	<p>81. Розширений метод Гюккеля. Знаходження елементів матриці Фока.</p> <p>82. Рівняння Шрьодінгера для багатоядерних багатоелектронних систем.</p> <p>83. Власні значення та власні функції операторів. Ортонормованість функцій.</p> <p>84. Молекулярні терми.</p> <p>85. Молекулярні діаграми і реакційна здатність органічних сполук.</p> <p>Наводиться перелік питань та завдань для проведення підсумкової оцінки знань. Також можна надати посилання на веб-сторінку де розміщені вказані матеріали.</p>
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Схема курсу

Тиж. / дата / год.-	Тема, план, короткі тези	Форма діяльності (заняття)* *лекція, самостійна, дискусія, групова робота)	Література.*** Ресурси в інтернеті	Завдання, год	Термін виконання
1	<p>Предмет квантової механіки та квантової хімії. Основні етапи в становленні квантової теорії та тенденції розвитку квантової хімії як основного теоретичного фундаменту сучасної хімії.</p> <p>Основні постулати квантової механіки. Хвильові функції (функції стану), їх властивості. Імовірності результатів виміру фізичних величин, середнє значення. Густина імовірності, знаходження частинок в окремих точках простору.</p>	Лекція	<p>Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308.</p> <p>2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443.</p> <p>3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Кієво-Могилянська академія, 2009, с.458.</p>	Розрахунок оптимальної геометричної будови молекул семінар	1 тиждень
3	.Рівняння Шрьодінгера. Приклади розв'язку рівняння Шрьодінгера для простих задач: Рух вільної частинки, частинка в потенціальній ямі, лінійний гармонічний осцилятор, жорсткий ротатор.	лекція	<p>Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308.</p> <p>2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008.</p>	Семінар. Оператори квантової механіки	2 тиждень

			с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво- Могилянська академія, 2009, с.458.		
4	.Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома водню. Розділення змінних, представлення хвилевої функції.	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво- Могилянська академія, 2009, с.458.	Семінар. Рівняння Шрьодінгера	1 тиждень
5	Приєднаний поліном Лежандра, його властивості. Поліном Лягерра 8. Атомні орбіталі, їх радіальні та кутові складові. Атом гелію.	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво- Могилянська академія, 2009, с.458.	Семінар. Поліном Лежандра	1 тиждень
6	Наближені методи розв'язку квантово-механічних задач. Теорія збурень. Варіаційний принцип.Метод Рітца. Багатоелектронний атом.	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-	Семінар. Атомні орбіталі	1 тиждень

			Могілянська академія, 2009, с.458.		
7	Квантова механіка переходів між різними станами. Правила відбору. Спін-орбіталі. Детермінант Слейтера. Спін-орбітальна взаємодія 11. Наближені розвязки хвильового рівняння. Одноелектронне наближення 12. Молекулярне рівняння Шрьодінгера. Розділення електронного та ядерного рухів. Адіабатичне наближення.	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могілянська академія, 2009, с.458.	Семінар. Атом водню	1 тиждень
8	Метод конфігураційної взаємодії. Метод валентних схем. Рівняння Гартрі. Рівняння Гартрі-Фока.	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могілянська академія, 2009, с.458.	Семінар. Метод Гартрі-	1 тиждень
9	Метод СУП МО ЛКАО. Слейтерівські та гаусівські типи орбіталей. Теорема Купманса. Енергія іонізації. Спорідненість до електрона	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могілянська академія, 2009, с.458.	Семінар. Метод Гартрі Фока	1 тиждень

10	Електронна будова атомів. Правила Хунда. Принципи побудови періодичної системи.	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могилянська академія, 2009, с.458.	Семінар. Правила Хунда	1 тиждень
11	Наближені методи квантової хімії. Напівемпіричні методи. Метод орбіталей Гюккеля. Розширений метод Гюккеля.	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могилянська академія, 2009, с.458.	Семінар. Метод Гюккеля	1 тиждень
12	Методи ПНДП, ЧНДП, ППП, МЧНДП, АМ1, РМ3. Приклади напівемпіричних методів та їх можливості.	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могилянська академія, 2009, с.458.	Семінар. Напівемпіричні методи	1 тиждень
13	Параметри електронної структури: заряди на атомах, порядки звязків, індекси вільної валентності, індекси	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308.	Семінар. Параметри реакційної здатності	1 тиждень

	реакційної здатності. Використання параметрів електронної структури для прогнозування реакційної здатності молекул. Група методів ab initio. Рівняння Ротаана.		2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могилянська академія, 2009, с.458.		
14	Гібридизація як спосіб прогнозування просторової будови молекул, йонів та радикалів. Теорії гібридизації.	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могилянська академія, 2009, с.458.	Семінар. Гібридизація	1 тиждень
15	Квантово-хімічний опис хімічних реакцій. Поверхні потенціальної енергії.	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків. «Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могилянська академія, 2009, с.458.	Семінар. Поверхні потенціальної енергії	1 тиждень
16	.Збереження орбітальної симетрії в хімічних реакціях. Правила Вудворда Хофмана. 22. Основні напрямки розвитку квантової хімії.	лекція	Ковальчук Є.П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2.Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія . Харків.	Семінар. Правила Вудворда Гофмана	1 тиждень

			«Гімназія» 2008. с.443. 3.Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво- Могилянська академія, 2009, с.458.		
--	--	--	---	--	--