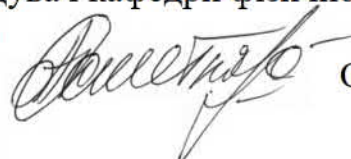


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Факультет: хімічний
Кафедра фізичної та колоїдної хімії

«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 хімія та будова речовини»

Освітньо-професійна програма «СЕРЕДНЯ ОСВІТА» («Хімія»)

Першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за предметною спеціальністю

014.06 Середня освіта Хімія

Галузь знання 01 Освіта/ Педагогіка

Львів 2022

Назва курсу	Квантова хімія та будова речовини
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	01 Освіта, педагогіка Спеціальність 014.06 середня освіта Хімія
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 хімії та будови речовини. 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 хімія та будова речовини» є вибірковою дисципліною з спеціальності «Хімія» для освітньої програми першого бакалаврського рівня вищої освіти за предметною спеціальністю 014.06 Середня освіта хімія. Галузь знань 01 освіта/педагогіка, яка викладається в 7 семестрі в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). В ході вивчення курсу студенти вивчають квантову хімію та будову речовини, які є фундаментальною дисципліною та лежить в основі теоретичної хімії. Метою даної дисципліни є ознайомлення студентів з основами квантової механіки та будови речовини і застосування її законів для розв'язку хімічних проблем. В ході реалізації програми курсу студенти знайомляться з основними квантово-хімічними методами розрахунку структури та будови молекул, електронних параметрів, термодинамічних характеристик та ін. «Квантова хімія та будова речовини» 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 хімія та будова речовини» є ознайомлення студентів з основами квантової механіки та будови речовини 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. «Кієво-Могилянська академія, 2009, с.458. 4.Вакарчук І.О. Квантова механіка. Львів. 2007. с.848.

	<p>5.Фларри Р. Квантова хімія. М.: Мир. 1985. с. 472.</p> <p style="text-align: center;">Додаткова література</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Яцимирський К.Б., Яцимирский 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.. Краснов К.С. Молекули та хімічний зв'язок. М.. 1977. с.280. <p>Інтернет ресурси</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) http://www.elsevier.com/ 2) http://www.wiley.com/ 3) http://pubs.acs.org/ 4) http://chem.lnu.edu.ua/visnykk/index.htm 5) https://ntsh-chem.github.io/ua/archive.html 6) http://www.sciencedirect.com/ 7) https://www.scopus.com/ 8) http://webofknowledge.com/ 9) https://www.researchgate.net/ 10) https://goldbook.iupac.org/ 11) http://nbuv.gov.ua/ <p>https://mon.gov.ua</p>
Тривалість курсу	Один семестр 98 год.
Обсяг курсу	48 годин аудиторних занять. З них 32 годин лекцій, 16 годин практичних занять та 50 годин самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>У результаті успішного проходження курсу студент набуде загальні та фахові компетентності:</p> <p>ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.</p> <p>ЗК 5. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.</p> <p>ПК 2. Здатність розкривати загальну структуру хімічних наук на основі взаємозв'язку основних учень про будову речовини, про періодичну зміну властивостей хімічних елементів та їх сполук, про спрямованість (хімічна термодинаміка), швидкість (хімічна кінетика) хімічних процесів та їх механізми.</p> <p>Програмні результати навчання:</p> <p>ПРУ 2. Уміє застосовувати знання сучасних теоретичних основ хімії для пояснення будови, властивостей і класифікації неорганічних і органічних речовин, періодичної зміни властивостей хімічних</p>

	<p>елементів та їх сполук, утворення хімічного зв'язку, направленості (хімічна термодинаміка) та швидкості (хімічна кінетика) хімічних процесів.</p> <p>ПРУ 5. Характеризує речовини і хімічні реакції в єдності якісної та кількісної сторін.</p>
Ключові слова	Квантова хімія, будова речовини, квантово-хімічні обчислення, електронна структура, геометрична будова, спектральні характеристики, дипольні моменти.
Формат курсу	Очний
	Проведення лекцій, лабораторних робіт, домашнього завдання колоквиумів та консультації для кращого розуміння тем
Теми	<p>Теми лекційних занять</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Предмет квантової хімії та будови речовини. Основні етапи в становленні будови речовини та квантової теорії та тенденції розвитку квантової хімії як основного теоретичного фундаменту сучасної хімії. 2. Рівняння Шрьодінгера. Приклади розв'язку рівняння Шрьодінгера для простих задач: Рух вільної частинки, частинка в потенціальній ямі, лінійний гармонічний осцилятор, жорсткий ротатор. 3. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома водню. Розділення змінних, представлення хвильової функції. 4. Атомні орбіталі, їх радіальні та кутові складові. Атом гелію. Графічне зображення орбіталей. 5. Наближені методи розв'язку квантово-механічних задач. Теорія збурень. Варіаційний принцип. Метод Рітца. Багатоелектронний атом. 6. Електронна будова атомів. Правила Хунда. Принципи побудови періодичної системи. Молекулярне рівняння Шрьодінгера. Розділення електронного та ядерного рухів. Адіабатичне наближення. 7. Наближені методи квантової хімії. Напівемпіричні методи. Метод орбіталей Гюккеля. Розширений метод Гюккеля. 8. Параметри електронної структури: заряди на атомах, порядки зв'язків, індекси вільної валентності, індекси реакційної здатності. Використання параметрів електронної структури для прогнозування реакційної здатності молекул. 9. Група методів <i>ab initio</i>. Рівняння Ротаана. 10. Гібридизація як спосіб прогнозування просторової будови молекул, йонів та радикалів. Теорії гібридизації. 11. Квантово-хімічний опис хімічних реакцій. Поверхні потенціальної енергії. 12. Просторове розміщення атомів в молекулі. Міжядерні віддалі, плоскі кути та дієдральні кути. Молекулярна механіка. Іонний зв'язок. Загальна характеристика іонного зв'язку. Енергетика йонних кристалів. Поляризація йонів. Вплив поляризації на властивості речовин. 13. Електричні властивості молекул. Власний дипольний момент молекул. Дипольний момент та симетрія молекул. Молярна рефракція Експериментальне визначення дипольних моментів. Застосування дипольних моментів.

	<p>14.Магнітні властивості молекул. Магнітна сприйнятливості молекул. Діамагнетики та парамагнетики. Експериментальне визначення магнітної сприйнятливості молекул.</p> <p>15. Неспецифічні міжмолекулярні взаємодії. Природа міжмолекулярних взаємодій. Орієнтаційні взаємодії, індукційні взаємодії, дисперсійні взаємодії.</p> <p>16.Енергія міжмолекулярних взаємодій. Йон – молекулярна взаємодія. Молекулярна спектроскопія. Загальна характеристика електронних спектрів</p>
--	---

Підсумковий контроль, форма	Залік в кінці року усний
------------------------------------	--------------------------

<p>Оцінювання підготовленості студентів</p> <p>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 Шрьодінгера для різних квантово-хімічних моделей. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома водню. Типи атомних орбіталей.</td> <td>10,0</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>Основи квантової хімії. Метод Гюккеля. Кулонівський інтеграл. Рівняння Рутаана. Обмінний інтеграл. Методи розрахунку молекул.</td> <td>10,0</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>Комп'ютерні програми для розрахунку структури та електронних властивостей молекул</td> <td>10,0</td> </tr> </tbody> </table>	№ з/п	Номери лекцій	Сума балів	1	Основи квантової механіки. Основні оператори квантової механіки Рівняння Шрьодінгера для різних квантово-хімічних моделей. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома водню. Типи атомних орбіталей.	10,0	2	Основи квантової хімії. Метод Гюккеля. Кулонівський інтеграл. Рівняння Рутаана. Обмінний інтеграл. Методи розрахунку молекул.	10,0	3	Комп'ютерні програми для розрахунку структури та електронних властивостей молекул	10,0	
№ з/п	Номери лекцій	Сума балів											
1	Основи квантової механіки. Основні оператори квантової механіки Рівняння Шрьодінгера для різних квантово-хімічних моделей. Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома водню. Типи атомних орбіталей.	10,0											
2	Основи квантової хімії. Метод Гюккеля. Кулонівський інтеграл. Рівняння Рутаана. Обмінний інтеграл. Методи розрахунку молекул.	10,0											
3	Комп'ютерні програми для розрахунку структури та електронних властивостей молекул	10,0											
<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.</p>													

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 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 три колоквиуми.
 Максимальна оцінка за колоквиуми- 30 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

	<table border="1"> <tr> <td>2</td> <td>Розрахунок фізико-хімічних параметрів та їх порівняння з експериментальними даними.</td> <td>Теплоти утворення та порівняння їх з даними NIST</td> <td>Звіт за роботу</td> <td>10.0</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>Робота з програмою Hyperchem</td> <td>Основні характеристики програми</td> <td>Звіт за роботу</td> <td>10.0</td> </tr> </table> <p>Кожен студент виконує індивідуальне домашнє завдання, яке містить 14 питань теоретичних та практичних проблем.</p> <p>Після завершення курсу кожен студент складає залік . Максимальна оцінка за складання заліку 100.балів</p>	2	Розрахунок фізико-хімічних параметрів та їх порівняння з експериментальними даними.	Теплоти утворення та порівняння їх з даними NIST	Звіт за роботу	10.0	3	Робота з програмою Hyperchem	Основні характеристики програми	Звіт за роботу	10.0
2	Розрахунок фізико-хімічних параметрів та їх порівняння з експериментальними даними.	Теплоти утворення та порівняння їх з даними NIST	Звіт за роботу	10.0							
3	Робота з програмою Hyperchem	Основні характеристики програми	Звіт за роботу	10.0							
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з вищої математики, фізики, інформатики, фізичної хімії - дисциплін, достатніх для сприйняття категоріального апарату «Квантової хімії та будови речовини», розуміння джерел та основних закономірностей.										
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Презентація, лекції, практичні роботи, розрахункові роботи, індивідуальні проекти, дискусія										
Необхідне обладнання	Із урахуванням особливостей навчальної дисципліни. Вивчення курсу потребує використання сучасних квантово-хімічних програм, як от:ACDlab 11, WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR, SCHRODINGER та інше програмне забезпечення, крім загально вживаних програм і операційних систем.										
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 30% балів, колоквіуми (3 к) 30 балів, виступи на семінарі 10 балів домашнє завдання 10 балів максимальна кількість балів 80. • залік:20% 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</p>										

	<p>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 заліку</p>	<p>Питання до заліку з курсу «Квантова хімія та будова речовини»</p> <ol style="list-style-type: none"> 1.. Предмет курсу „Квантова хімія та будова речовини” 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 інтеграли 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 AM-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 принципи 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.
81. Розширений метод Гюккеля. Знаходження елементів матриці Фока.
82. Рівняння Шрьодінгера для багатоядерних багатоелектронних систем.
83. Власні значення та власні функції операторів. Ортонормованість функцій.
84. Молекулярні терми.
85. Молекулярні діаграми і реакційна здатність органічних сполук.
- 86.Гібридизація як спосіб прогнозування просторової будови молекул, йонів та радикалів. Теорії гібридизації.
87. Квантово-хімічний опис хімічних реакцій. Поверхні потенціальної енергії.
88. Просторове розміщення атомів в молекулі. Міжядерні віддалі, плоскі кути та дієдральні кути.
89. Молекулярна механіка. Іонний зв'язок. Загальна характеристика іонного зв'язку.
- 90.Енергетика йонних кристалів. Поляризація йонів. Вплив поляризації на властивості речовин.
91. Електричні властивості молекул. Власний дипольний момент молекул. Дипольний момент та симетрія молекул.
- 92.Молярна рефракція Експериментальне визначення дипольних моментів. Застосування дипольних моментів.
- 93 .Магнітні властивості молекул. Магнітна сприйнятливність молекул. Діамагнетики та парамагнетики
93. Неспецифічні міжмолекулярні взаємодії. Природа міжмолекулярних взаємодій.
94. Орієнтаційні взаємодії, індукційні взаємодії, дисперсійні взаємодії.
- 95.Енергія міжмолекулярних взаємодій. Йон – молекулярна взаємодія. Молекулярна спектроскопія. Загальна характеристика електронних спектрів

	Наводиться перелік питань та завдань для проведення підсумкової оцінки знань. Також можна надати посилання на веб-сторінку де розміщені вказані матеріали.
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

***ПРИМІТКА**

Зовнішня форма вираження силябусу може бути відмінною та поданою до візуального сприйняття не лише у формі таблиці. Бажаним є дотримання самої структури. Можливе наповнення силябусу додатковими розділами із розширенням інформації про курс. Запропонована форма є лише зразком.

**** 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	Предмет квантової хімії та будови речовини Основні етапи в становленні квантової.	Лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс	Розрахунок оптимальної геометричної будови молекул, семінар	1 тиждень
2	Рівняння Шрьодінгера. Приклади розв'язку рівняння Шрьодінгера для простих задач:	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс		
3	Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома водню. Розділення змінних, представлення хвильової функції..	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс	Семінар. Розв'язки рівняння Шрьодінгера для простих випадків	1 тиждень

4	Приєднаний поліном Лежандра, його властивості. Поліном Лягерра 8. Атомні орбіталі, їх радіальні та кутові складові. Атом гелію.	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс		
5	. Наближені методи розв'язку квантово-механічних задач. Теорія збурень. Варіаційний принцип. Метод Рітца. Багатоелектронний атом.	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс	Семинар. Принципи побудова періодичної системи	1 тиждень
6	Електронна будова атомів. Правила Хунда. Принципи побудови періодичної системи.	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс		
7	Наближені методи квантової хімії. Напівемпіричні методи. Метод орбіталей Гюккеля. Розширений метод Гюккеля.	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс	Семинар. Атом водню. Атомні орбіталі	1 тиждень
8	Параметри електронної структури: заряди на атомах, порядки зв'язків, індекси Вільної валентності, Індекси реакційної здатності. Використання параметрів електронної структури для прогнозування реакційної здатності молекул.	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс		
9	Група методів ab initio. Рівняння Ротаана	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс	Семинар. Розрахунок термодинамічних параметрів	1 тиждень
10	Гібридизація як спосіб прогнозування просторової будови молекул, йонів та радикалів. Теорії гібридизації	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс		

11	.Квантово-хімічний опис хімічних реакцій. Поверхні потенціальної енергії.	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс	Семінар. Метод Гюккеля	1 тиждень
12	Просторове розміщення атомів в молекулі. Міжядерні віддалі, плоскі кути та дієдральні кути. Молекулярна механіка. Іонний зв'язок.	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс		
13	Електричні властивості молекул. Власний дипольний момент молекул. Дипольний момент та симетрія молекул. Молярна рефракція. Експериментальне визначення дипольних моментів. Застосування дипольних моментів	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс	Семінар. Параметри реакційної здатності	1 тиждень
14	Магнітні властивості молекул. Магнітна сприйнятливність молекул. Діамагнетики та парамагнетики.	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс		
15	Неспецифічні міжмолекулярні взаємодії. Природа міжмолекулярних взаємодій..	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс	Семінар. Розрахунок дипольних моментів	1 тиждень
16	. Енергія між молекулярних взаємодій. Іон – молекулярна взаємодія. Молекулярна спектроскопія. Загальна характеристика електронних спектрів	лекція	Літер [1-5]. Інтернет ресурс		