

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра прикладної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан хімічного факультету



Калугін О.М.

“ 31 ” серпня 2023 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Квантова хімія

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти бакалавр

/

галузь знань 10 Природничі науки

(шифр і назва)

спеціальність 102 Хімія

(шифр і назва)

освітня програма Освітньо-професійна програма “Хімія”

(шифр і назва)

спеціалізація _____

(шифр і назва)

вид дисципліни обов'язкова

(обов'язкова / за вибором)

факультет хімічний

2023__ / 2024__ навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету

“ 30 ” серпня 2023 року, протокол № 8

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ: (вказати авторів, їхні наукові ступені, вчені звання та посади)

Черановський Владислав Олегович, д. фіз-мат. н., професор кафедри теоретичної хімії
Кравченко Олексій Андрійович, к.х.н., доцент кафедри прикладної хімії
Токарев Віктор Володимирович, старший викладач кафедри прикладної хімії

Програму схвалено на засіданні кафедри
прикладної хімії

Протокол від “ 29 ” серпня 2023 року № 1

Завідувач кафедри прикладної хімії



(підпис)

Валентин ЧЕБАНОВ

(прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми “Хімія”
Гарант освітньо-професійної програми “Хімія”



(підпис)

Олег КАЛУГІН

(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією
хімічного факультету

назва факультету, для здобувачів вищої освіти якого викладається навчальна дисципліна

Протокол від “ 29 ” серпня 2023 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету



(підпис)

Павло ЄФІМОВ

(прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “ Квантова хімія ” складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки бакалавр (назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня) спеціальності (напрямку) 102 «хімія»

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни

Сформувати уявлення про теоретичні методи, якими вивчають будову хімічної речовини, зокрема електронну будову атомів та молекул, а також сформувати вміння самостійно розраховувати електронну будову молекулярних систем з використанням сучасних квантово-хімічних обчислювальних програм.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни

- поглиблене ознайомлення з фізичними законами, які застосовуються у теорії будови речовини;
- ознайомлення з основними законами квантової механіки з наголосом на електронну будову атомів і молекул;
- набуття практичних навичок у тлумаченні та розрахунку електронної будови та спектральних характеристик молекулярних структур шляхом виконання практичних і контрольних робіт

Вивчення дисципліни розвиває наступні загальні та фахові компетентності:

- ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності
- ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.
- ЗК 3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
- ЗК 4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.
- ЗК 5. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.
- ЗК 6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).
- ЗК 7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.
- ЗК 8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.
- ЗК 9. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).
- ЗК 10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.
- ЗК 11. Здатність діяти на основі етичних міркувань (мотивів).
- ЗК 12. Здатність працювати автономно.
- ЗК 14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.
- ФК 1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.
- ФК 2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.
- ФК 3. Здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент.
- ФК 4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.
- ФК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.
- ФК 6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.

ФК 7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).

1.3. Кількість кредитів 5

1.4. Загальна кількість годин 150

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна / за вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
2-й	2-3-й
Семестр	
3-й	3-4-й
Лекції	
48 год.	12 год.
Практичні, семінарські заняття	
32 год.	4 год.
Лабораторні заняття	
- год.	4 год.
Самостійна робота	
70 год.	130 год.
Індивідуальні завдання	
год.	

1.6. Заплановані результати навчання

Згідно з вимогами освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми студенти повинні досягти таких результатів навчання:

знати: основні закони квантової механіки та квантової хімії, межі застосування різних методів квановохімічних розрахунків.

вміти: проводити розрахунки електронної будови молекул та інтерпретувати результати розрахунків, творчо підійти до вибору методу розрахунку.

P1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.

P2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.

P3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.

P5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.

P6. Знати методологію та організації наукового дослідження.

P7. Вільно спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою з професійних питань, усно і письмово презентувати результати досліджень з хімії іноземною мовою, брати участь в обговоренні проблем хімії.

P8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефакхівців.

P9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.

P10. Планувати, організовувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ I. 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. Мезоатоми та мезонна хімія.

Тема 2. Будова атомних ядер та їх загальна характеристика.

Виникнення і поширеність хімічних елементів у Всесвіті. Загальна характеристика атомних ядер. Ізотопи, ізобари та ізомери. Залежність радіуса атомного ядра від атомного числа. Дефект маси та енергія зв'язку. Основні причини появи хімічних елементів. Термоядерні реакції та еволюція хімічного складу зірок. Поширеність хімічних елементів у Всесвіті.

Тема 3 Класична електростатична теорія будови малих молекул. Мультипольне розкладення.

Використання закон Кулона (відштовхування електронних пар) для прогнозування геометрії малих молекул. Недостатки класичного електростатичного опису хімічного зв'язку. Міра полярності молекул – дипольний момент. Електричний потенціал системі зарядів. Мультипольне розкладення для електричного потенціалу молекулу у віддаленій точці. Дипольний і квадрупольний моменти та їх властивості. Взаємодія двох точкових диполів на великій відстані. Орієнтаційні міжмолекулярні взаємодії. Орієнтаційна та деформаційна поляризованість молекул.

Розділ 2. Основи квантової механіки молекул

Тема 4. Основні постулати квантової механіки. Оператори фізичних величин.

Рівняння Шредінгера.

Хвильова функція. Основні властивості хвильової функції, її імовірнісна інтерпретація. Електронна густина. Принцип суперпозиції. Діжковий формалізм Дірака. Лінійні ермітові оператори і 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 виміру. Закони збереження у квантовій механіці. Стаціонарне рівняння Шредінгера.

Тема 5. Модельні квантовомеханічні задачі

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

Тема 6. Квантовий осцилятор

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

Тема 7. 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 квадрата кутового моменту. Сферичні гармоніки.

Тема 8. Атом водню. Атомні орбіталі

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

Тема 9. Спін електронної системи. Спінкові функції

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

Тема 10. Хвильова функція багатоелектронної системи

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

Тема 11. 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. Тонка будова атомних спектрів. Правила відбору для електронних переходів. Вплив зовнішнього поля: зняття виродження і розщеплення спектральних ліній у магнітному та електричному полях (ефект Зеемана, ефект Штарка).

Тема 12. Наближені методи розв'язку рівняння Шредингера

Варіаційний метод, варіаційна нерівність. Засоби вибору пробних функцій. Метод лінійних комбінацій Релея–Ріцца. Рівняння для знаходження варіаційних коефіцієнтів. Тема 13. Квантово-механічна теорія збурень. Теорема Вігнера-Неймана. Теорія збурень для молекулярного гамільтоніану. Поправки першого та другого порядку по малому параметру для енергії молекулярної системи. Випадок вироджених енергетичних станів. Теорема Вігнера-Неймана.

Розділ 3. Основні методи квантової хімії

Тема 14. Молекулярне рівняння Шредингера. Адіабатичне наближення. Поверхня потенційної енергії.

Стационарне рівняння Шредингера для молекули як системи електронів і ядер, що взаємодіють по закону Кулона. Загальний вид хвильової функції в адіабатичному наближенні. Адіабатичний потенціал та поверхня потенційної енергії (ППЕ). Особливі точки ППЕ та явище хімічної ізомерії. Вироджені стани молекул та теорема Яна-Теллера.

Тема 15. Опис коливань молекул у гармонічному наближенні. Нормальні коливання.

Ефекти ангармонізму

Рівняння Шредингера для ядерних рухів. Гармонічне наближення для адіабатичного потенціалу. Нормальні коливання на прикладі молекули водню. Квантовий ангармонічний осцилятор. Головна смуга поглинання та обертони. Дисоціація двохатомної молекули.

Тема 16. Молекулярний іон водню

Електронне рівняння Шредингера для молекулярного іону водню. Наближення МО ЛКАО. Орбітальні енергії та орбітальні коефіцієнти. Інтеграл перекриття, залежність від між'ядерної відстані. Кулонівський та резонансний інтегралі. Якісний аналіз станів двохатомних молекул. Енергетична діаграма МО. Опис властивостей двохатомних молекул.

Тема 17. Метод молекулярних орбіталей Хюкеля

Обчислювальна схема методу. Електронна структура лінійних та циклічних полієнів. Розподілення електронів в молекулах. Формули Коулсона для електронної густини і порядку зв'язку. Спінова густина. Молекулярні діаграми. Кореляційна крива залежності довжини від порядку зв'язку. Правило ароматичності. Антиароматичність. Електронна будова альтернативних вуглеводнів. Індокси реакційної здатності. Елементи і операції симетрії. Класифікація типів симетрії молекулярних орбіталей простих супряжених

молекул. Енергетичний спектр поліена в простому методі Хюкеля. Енергетичні зони. Провідники та напівпровідники з точки зору метода Хюкеля.

Тема 18. Методи ССП МО ЛКАО Хартрі-Фока-Рутаана.

Напівемпіричні та неемпіричні (ab initio) 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. Електронна кореляція. Наближення нульового диференційного перекриття. Межі застосування метода Хартрі-Фока.

Тема 19. Методи урахування електронної кореляції. Конфігураційна взаємодія.

Сильно корельовано багато електронні системи. Необхідність ретельного обліку відштовхування електронів. Взаємодія електронних конфігурацій.

Тема 20. Простий метод валентних зв'язків для квазігомеополярних багатоатомних молекул.

Інтерпретація хімічного зв'язку у рамках метода валентних зв'язків. Концепція резонансу. Резонансні структури. Порівняння методу молекулярних орбіталей і методу валентних зв'язків. Метод спінового гамільтоніана.

Назви розділів	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
Розділ 1. Елементи теорії будови речовини												
Разом за розділом 1	22	6	6			8	42	2				40
Розділ 2. Основи квантової механіки молекул												
Разом за розділом 2	68	22	14			28	49	5	4			40
Розділ 3. Основні методи квантової хімії												
Разом за розділом 3	60	20	12			24	49	5		4		50
Усього годин	150	48	32			70	150	12	4	4		130

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Теорія Бора та атомні спектри. Будова мезоатомів.	4
2	Обчислення дипольних і квадрупольних моментів малих молекул. Оцінка енергії взаємодії точкових диполей.	2
3	Основні постулати квантової механіки. Стационарне рівняння Шредингера для модельних задач. Обчислення середніх значень фізичних величин для модельних задач.	2
4	Обчислення комутаторів операторів координати, кутового моменту та імпульса. Задача на власні значення	4
5	Енергетичний спектр і хвильові функції квантового гармонічного осцилятора. Двохатомна молекула у наближенні гармонічного осцилятора.	2
6	Атомні орбіталі та радіальна функція розподілу. Квантові числа та їх інтерпретація.	2
7	Атомні терми та схема Расела-Саундерса. Принцип Паулі. Спін-орбітальна взаємодія. Тонка будова атомних спектрів.	4
8	Адіабатичний потенціал та поверхня потенційної енергії молекул. Нормальні коливання. Ефекти ангармонізму на прикладі	4

	коливальних спектрів двохатомних молекул.	
9	Метод молекулярних орбіталей Хюкеля і електронна будова органічних молекул з супряженими хімічними зв'язками.	2
10	Розрахунки енергетичного спектру модельних молекулярних структур у рамках одноелектронного наближення Хюкеля	4
11	Розрахунки розподілу зарядів у основному та збудених станах моделних π -електронних структур у рамках методу Хюкеля	2
	Разом	32

5. Завдання для самостійної роботи

Вид самостійної роботи: підготовка до практичних занять за матеріалами підручників та конспектом лекцій.

№ з/п	Зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Тема 1. Елементарні частинки та основні взаємодії у Всесвіті.	4
2	Тема 2. Будова атомного ядра та їх загальна характеристика. Виникнення і поширеність хімічних елементів у Всесвіті.	4
3	Тема 3 Класична електростатична теорія будови малих молекул. Мультипольне розкладення.	4
4	Тема 4. Основні постулати квантової механіки. Оператори фізичних величин. Рівняння Шредінгера.	4
5	Тема 5. Модельні квантовомеханічні задачі	4
6	Тема 6. Квантовий осцилятор	4
7	Тема 7. Квантування кутового моменту	4
8	Тема 8. Атом водню. Атомні орбіталі	4
9	Тема 9. Спін електронної системи. Спінкові функції.	2
10	Тема 10. Хвильова функція багатоелектронної системи.	2
11	Тема 11. Атомні терми. Спін-орбітальна взаємодія.	4
12	Тема 12. Наближені методи розв'язку рівняння Шредінгера.	2
13	Тема 13. Квантово-механічна теорія збурень. Теорема Вігнера-Неймана.	2
14	Тема 14. Молекулярне рівняння Шредингера. Адіабатичне наближення. Поверхня потенційної енергії.	4
15	Тема 15. Опис коливань молекул у гармонічному наближенні. Нормальні коливання. Ефекти ангармонізму.	4
16	Тема 16. Молекулярний іон водню.	4
17	Тема 17. Метод молекулярних орбіталей Хюкеля.	4
18	Тема 18. Методи ССП МО ЛКАО Хартрі-Фока-Рутаана.	4
19	Тема 19. Методи урахування електронної кореляції. Конфігураційна взаємодія.	2
20	Тема 20. Простий метод валентних зв'язків для квазігомеоплярних багатоатомних молекул.	4
	Разом	70

6. Індивідуальні завдання

7. Методи контролю

Рішення задач на практичних заняттях, поточні контрольні завдання, контрольна робота, екзамен.

8. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання					Екзамен (залікова робота)	Сума
Розділ 1	Контрольна робота, передбачена навчальним планом	Контрольна робота, передбачена навчальним планом	Індивідуальне завдання	Разом		
T1-3	T4-T13	T14-20				
20	20	20	-	60	40	100

T1, T2 ... – теми розділів.

Для допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен виконати всі контрольні роботи і набрати не менше 25 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для екзамену	для заліку
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

Студент, який успішно вивчав навчальну дисципліну протягом семестру може отримати до 40 додаткових (заохочувальних) балів та бути звільненим від семестрового екзамену з навчальної дисципліни з одержанням оцінки „відмінно” (за умови, що набрана сума балів не менше 95)

9. Рекомендована література

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Мультимедійні презентації лекцій.

Основна література

1. Черановський В.О., Іванова К.Ф. Основи будови речовини. Навчальний посібник для студентів хімічного факультету –Харків: ХНУ, 2004. -93 с.
2. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. –Харків: Гімназія, 2008. -443 с.
3. Цюлике Л. Квантовая химия. т.1.-М.: Мир, 1976. -512 с
4. П. Эткинс Физическая химия. т.2. –М.: Мир, 1980. – 584 с.

Допоміжна література

1. Вакарчук І.О. Квантова механіка. Четверте видання. Львів, вид. Львівського університету, 2012. -872 с.
2. Кобушкін О.П. Квантова механіка. Київ, 2016. -253с.
3. Кларк Т. Компьютерная химия. -М.: Мир, 1990.- 381 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М Квантовая механика. Часть III. -М.: Наука, 1975. – 767 с.

10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_chemistry
2. http://chemwiki.ucdavis.edu/Physical_Chemistry/Quantum_Mechanics
3. Файл-сервер хімічного факультету ХНУ імені В.Н. Каразіна: <http://www-chemistry.univer.kharkov.ua/uk/>