

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

Кафедра прикладної хімії

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Перший проректор

\_\_\_\_\_

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

## **РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

### **Квантова хімія**

За напрямом підготовки 040101 "хімія"

для спеціальності 6.040101 "хімія"

хімічного факультету

Кредитно-модульна система  
організації навчального процесу

Робоча програма навчальної дисципліни „Квантова хімія” для студентів за напрямом підготовки 040101 "хімія" для спеціальності 6.040101 "хімія".

Розробники: **Черановський Владислав Олегович, д. фіз-мат. н., професор кафедри прикладної хімії**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри прикладної хімії

Протокол № 8 від “ 24 ” 04 2014 р.

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ В.А. Чебанов

“ 24 ” 04 2014 р

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 10 від “ 14 ” 05 2014 р.

“ 14 ” 05 2014 р.

Голова \_\_\_\_\_

Юрченко О.І.

### 1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Кількість кредитів: 4,5	Галузь знань 0401 “Природничі науки”	денна форма навчання нормативна дисципліна
Модулів – 3	Напрямок підготовки 040101 "хімія" Спеціальність 6.040101 "хімія"	Рік підготовки: III -й
Загальна кількість годин 162		Семестр 5 -й
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 5 самостійної роботи студента – 4	Освітньо-кваліфікаційний рівень: бакалавр	Лекції 54 год.
		Практичні 36 год.
		Самостійна робота 72 год.
		Вид контролю: контрольні роботи, екзамен

### 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: 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.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

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

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

### 3. Програма навчальної дисципліни

#### Модуль 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 атомного ядра 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.

#### Модуль 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. Спінові 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. Спінові 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 Зеємана, 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.

## **Модуль 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 Шредінгера 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 Шредінгера 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 альтернантних вуглеводнів. Індеси реакційної здатності. Елементи і операції симетрії. Класифікація типів симетрії молекулярних орбіталей простих супржених молекул. Енергетичний спектр полієна 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 інтегралі, їх фізичний зміст. Орбітальні енергії та їх зв'язок з повною електронною енергією. Оператор Фока (фокіан). Рівняння Хартрі-Фока. Електронна кореляція. Проблема обчислювання інтегралів міжелектронного відштовхування. 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. Теорія збурень Мелера-Плесета. Метод зв'язаних кластерів.

*Тема 20. Простий метод валентних зв'язків для квазігомеоплярних 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.

## 4. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього	у тому числі				
л		п	лаб	інд	ср	
1	2	3	4	5	6	7
<b>Модуль 1</b>						
Тема 1	8	2	2			4
Тема 2	8	2	2			4
Тема 3	10	4	2			4
Разом за модулем 1	26	8	6			12
<b>Модуль 2</b>						
Тема 4	10	4	2			4
Тема 5	8	2	2			4
Тема 6	8	2	2			4
Тема 7	8	2	2			4
Тема 8	8	2	2			4
Тема 9	8	2	2			4
Тема 10	4	2				2
Тема 11	10	4	4			2
Тема 12	4	2				2
Тема 13	4	2				2
Разом за модулем 2	72	24	16			32
<b>Модуль 3</b>						
Тема 14	7	3				4
Тема 15	11	3	4			4
Тема 16	8	2	2			4
Тема 17	24	8	8			8
Тема 18	6	2				4
Тема 19	4	2				2
Тема 20	4	2				2
Разом за модулем 3	64	22	14			28
<b>Усього годин</b>	162	54	36			72

## 6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	
	ср	пір
Тема 1. Теорія Бора та атомні спектри.	4	
Тема 2. Будова мезоатомів та їх використання у дослідженнях хімічної будови речовини.	4	
Тема 3 Обчислення дипольних моментів малих молекул. Оцінка енергії взаємодії точкових диполей. Обчислення квадрупольних	4	

моментів малих молекул.		
Тема 4. Основні постулати квантової механіки. Обчислення комутаторів операторів.	4	
Тема 5. Стаціонарне рівняння Шредингера для модельних задач. Обчислення середніх значень оператора координати для модельних задач.	4	
Тема 6. Коливальний спектр двохатомних молекул.	4	
Тема 7. Обчислення комутаторів операторів кутового моменту та імпульса.	4	
Тема 8. Атомні орбіталі та радіальна функція розподілу.	4	
Тема 9. Спінові функції багатоелектронної системи.	4	
Тема 10. Синглетні та триплетні хвильові функції. Бозони та ферміони.	2	
Тема 11. Терми Рассела-Саундерса та їх систематика.	4	
Тема 12. Метод Релея-Ріцца.	2	
Тема 13. Теорія збурень для молекулярного гамільтоніану	2	
Тема 14. Особливі точки ППЕ та явище хімічної ізомерії..	4	
Тема 15. Ефекти ангармонізму молекулярних коливань.	4	
Тема 16. Енергетична діаграма молекулярних орбіталей.	4	
Тема 17. Індекс вільної валентності та розподіл зарядів на атомах у методі Хюкеля. Використання молекулярної симетрії у розрахунках методом Хюкеля	8	
Тема 18. Метод Парізера-Парра-Попла.	2	
Тема 19. Застосування методу зв'язаних кластерів у розрахунках молекулярних характеристик.	2	
Тема 20. Спін основного стану альтернантних молекул з супряженими зв'язками.	2	

### 7. Методи навчання

Лекції, виконання практичних робіт, самостійна робота.

### 8. Методи контролю

Рішення задач на практичних заняттях, контрольні роботи за модулями, екзамен.

### 9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота			Підсумковий семестровий контроль (екзамен)	Сума
Модуль 1	Модуль 2	Модуль 3		
Теми 1-3	Теми 4-13	Теми 14-22	55	100
Контрольна робота 15	Контрольна робота 15	Контрольна робота 15		

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 ECTS	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	<b>A</b>	відмінно
80-89	<b>B</b>	добре
70-79	<b>C</b>	
60-69	<b>D</b>	задовільно
50-59	<b>E</b>	
1-49	<b>FX</b>	незадовільно

### 10. Методичне забезпечення

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

### 11. Рекомендована література

#### Базова

1. Слета Л.А., Иванов В.В. Квантовая химия. –Харьков: Фолио, 2007. -476 с.
2. Боженко К.В. Основы квантовой химии М.: Российский университет дружбы народов, 2010.- 128 с.
3. Кларк Т. Компьютерная химия. -М.: Мир, 1990.- 381 с.
4. П. Эткинс Физическая химия. т.2. –М.: Мир, 1980. – 584 с.
5. Черановський В.О., Іванова К.Ф. Основи будови речовини. Навчальний посібник для студентів хімічного факультету –Харків: ХНУ, 2003. -121 с.

#### Допоміжна

1. Харгитаи И., Харгитаи М. Симметрия глазами химика. -М.: Мир, 1989.- 494 с.
2. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения.. -М.: Мир,1983.- 396 с.
3. Кузьмичев В.Э. Законы и формулы физики. -Киев: Наукова Думка, 1989.- 862 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М Квантовая механика. Часть III. -М.: Наука, 1975. – 767 с.
5. Цюлике Л. Квантовая химия. т.1.-М.: Мир, 1976. -512 с