

Міністерство освіти і науки, молоді та спорту 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

Харків – 2014

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

Розробники: **Зіolkовський Дмитро Володимирович, к.х.н., доц. 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”	заочна форма навчання нормативна
Модулів – 2	Напрямок підготовки 040101 "хімія" Спеціальність 6.040101 "хімія" Освітньо-кваліфікаційний рівень: бакалавр	Рік підготовки: 3 -й
Загальна кількість годин 162		Семестр 5 -й
		Лекції 12 год.
		Практичні 8 год.
		Самостійна робота 142 год.
		Вид контролю: контрольна робота, 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	ср
1	2	3	4	5	6
Модуль 1					
Тема 1	22	2			20
Тема 2	23	1	2		20
Тема 3	24	1	2		21
Разом за модулем 1	69	4	4		61
Модуль 2					
Тема 4	22	2			20
Тема 5	21	2			19
Тема 6	24	2	2		21
Тема 7	24	2	2		21
Разом за модулем 2	93	8	4		81
Усього годин	162	12	8		142

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 поліенів	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. Діаграми коливальних рівнів і коливальний спектр двухатомних систем.	20
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.	21

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 локалізації Уеланда. Метод Коулсона та Лонге-Хіггінса. Теорія граничних електронів Фукуї.	21
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.	21

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, контрольна робота, 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	A	зараховано
80-89	B	

70-79	C	
60-69	D	
50-59	E	
1-49	FX	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. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. — М.: Мир, 2001. — 519 с.
3. Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков. М.:Высш.шк.,1980. 215 с.
4. Мелешина А.М. Курс квантовой химии. Воронеж: Изд-во Воронеж. ун-та,1981,198 с.
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.:Высш.шк.,1979. 407с.
6. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К. Химическая связь. Киев: Вища шк., 1975. 304 с.
7. Стародуб В.О. Теоретико-групові методи в хімії. Х.:ХНУ імені В.Н.Карабіна, 2009.- 192 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.