

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Голова науково-методичної ради  
хімічного факультету

 Надія СТЕЦЬ

«02» вересня 2024 р.

## РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

### ОК 2.6. Квантова хімія

шифр ОК ОПП і повна назва навчальної дисципліни

для здобувачів вищої освіти

рівень вищої освіти першій (бакалаврський)

галузь знань 10 Природничі науки

спеціальність 102 Хімія

освітня програма Хімія лікарських речовин

рік набору 2023/2024 форма навчання денна термін навчання 3 роки 10 місяців

вид дисципліни обов'язкова

Розробник Плясовська Катерина Андріївна, доц. кафедри ХФХ, канд. хім. наук, доцент  
вказати розробників: ІІІБ, посада, науковий ступінь, вчене звання  підпис

Погоджено гарант ОП

  
(підпис)

Віталій ПАЛЬЧИКОВ  
(ім'я та прізвище)

Робоча програма схвалена на засіданні кафедри фізичної, органічної та неорганічної хімії  
Протокол від « 27 » червня 2024 року № 22

Ухвалено на засіданні науково-методичної ради хімічного факультету  
Протокол від « 2 » вересня 2024 року № 1

Дніпро  
2024

## Опис навчальної дисципліни

Навчальний рік (роки*) викладання дисципліни	Курс	Семестр	Підсумковий контроль				Індивідуальні завдання		Кредитів ECTS	Обсяг роботи студента (години)						
			екзамен	диф. залік	залік	курсова робота	форма	кількість		всього	аудиторні					самостійна робота
											всього аудиторних	лекції	практичні заняття	семінарські заняття	лабораторні заняття	
2024/25	2	3	3				кпр	1	4	120		24	32			64
20__/_																
20__/_																
20__/_																

### 1. Мета дисципліни

- ознайомлення студентів спеціальності «Хімія» з базовими знаннями з галузі квантової хімії та її можливого застосування щодо принципів квантово-хімічних розрахунків та сучасних уявлень про будову атому та хімічний зв'язок;
- надання студенту знання загальних законів квантової хімії та квантової механіки;
- оволодіння основними прийомами квантово-хімічних досліджень (розрахунків) та обробки отриманих результатів;
- прогнозування окремих властивостей об'єктів мікросвіту, їх зв'язок з макровластивостями речовин.

### **Вивчення дисципліни забезпечує формування компетентностей за ОП:**

ІК Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми у галузі професійної діяльності або у процесі навчання, що передбачає застосування певних теорій та методів хімії і характеризується комплексністю та невизначеністю умов.

ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу на основі логічних аргументів та перевірених фактів.

ЗК2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

СК1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії. СК2. Здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії.

СК4. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.

### 2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни.

Знання з дисциплін: «Загальна та неорганічна хімія» та «Фізика».

### 3. Результати навчання за дисципліною та їх співвідношення із програмними результатами навчання.

№	Результати навчання за дисципліною	Програмні результати навчання за ОП	Номери тем
1	Знати методологічні засади квантово-	ПР01. Розуміння ключових	Т1.1,

	хімічного підходу до вивчення фізичних та хімічних явищ.	хімічних понять, основних фактів, концепцій, принципів і теорій, 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.	T1.2, T2.2
2	Знати основні (фундаментальні) закони квантової хімії та їх наслідки.	ПР02. Розуміння основ математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.	T1.1 T1.2, T1.3, T2.1, T2.2,
3	Знати основи розрахункових методів квантової хімії.	ПР04. Розуміти основні закономірності та типи хімічних реакцій та їх характеристики.	T2.1, T2.2, T1.4
4	Знати головні напрями квантово-хімічних досліджень.	ПР05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин. ПР07. Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.	T1.1, T2.4
5	Вміти застосовувати методологічні засади квантово-хімічного підходу до вивчення хімічних процесів.	ПР13. Аналізувати та оцінювати дані, синтезувати нові ідеї, що стосуються хімії та її прикладних застосувань.	T2.1, T2.3, T2.4, T1.5,
6	Знати основні принципи та прийоми квантово-хімічних досліджень перебігу хімічних та фізико-хімічних процесів, застосування їх для опису атомів та молекул, хімічного зв'язку. Використання їх для моделювання властивостей речовини з урахуванням можливого впливу різних факторів.	ПР15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних. ПР16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.	T. 1.5, T2.4, T2.3
7	Вміти користуватись навичками квантово-хімічних досліджень для аналізу та прогнозування будови речовини.	ПР18. Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії. ПР20. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії. ПР30. Оперувати знаннями про способи отримання та галузі застосування неорганічних матеріалів, застосовувати методи	T2.1, T2.3, T2.4, T1.5,
8	Вміти узагальнювати знання з квантової хімії, застосовувати їх до інтерпретації теорій в різних галузях природознавства.		

		наноелектрохімії для розв'язання практичних задач; володіти основними положеннями теорії електрохімії, вміти застосовувати їх при використанні електрохімічних технологій.	
--	--	--	--

#### 4. Структура навчальної дисципліни.

№ п/п	Номер і назва теми	Кількість годин*				
		лекції	практичні заняття	семінарські заняття	лабораторні заняття	самостійна робота
<b>3 семестр</b>						
<i>Розділ 1. Основи квантової механіки</i>						
1	Тема 1.1. Становлення квантової теорії	1	2			6
2	Тема 1.2. Рівняння руху частинки та хвилі у класичній механіці.	2	4			6
3	Тема 1.3. Постулати квантової хімії. Хвильова функція. Рівняння Шредингера. Оператори в квантовій хімії.	3	4			8
4	Тема 1.4. Розв'язання рівняння Шредингера для окремих випадків. Гідрогенподібний атом. Квантові числа.	3	4			8
5	Тема 1.5. Класифікації атомів. Атомні терми.	3	2			6
<i>Розділ 2. Основи квантової хімії</i>						
8	Тема 2.1. Багатоелектронні атоми. Основні підходи у чисельних методах.	3	4			6
9	Тема 2.2. Хімічний зв'язок (ММО, ВЗ). Метод Гюккеля.	4	6			8
10	Тема 2.3. Елементи теорії симетрії в квантовій хімії	4	4			8
11	Тема 2.4. Напівемпіричні методи в квантовій хімії	1	2			8
	<b>Всього</b>	<b>24</b>	<b>32</b>			<b>64</b>

#### Тематика практичних занять

№ Темі	Тематика (назва) лабораторного заняття	Кількість годин	Рекомендована література (№ з переліку)
<i>Розділ 1. Основи квантової механіки</i>			

Тема 1.1	Історія становлення квантової хімії	1	№ 1–3 додаткова №1
Тема 1.2	Математичний апарат для розв'язання рівняння руху. Закони збереження.	1	№ 1–3 додаткова №1
Тема 1.3.	Рівняння де Бройля, принцип Паулі, невизначенність Гейзенберга. Основні правила операторної математики.	4	№ 1–3 додаткова №1
Тема 1.4.	Вільна частинка. Потенційна скриня. Гармонійний осцилятор. Жорсткий ротатор. Одноелектронне наближення.	4	№ 1–3 додаткова №1,4
Тема 1.5.	Графічне зображення атомних орбіталей. Складання атомних термів.	2	№ 1, додаткова №2
<b>Розділ 2. Основи квантової хімія</b>			
Тема 2.1	Варіаційний метод, теорія збурень, метод самоузгодженого поля Гартрі та Гартрі-Фока. Атом Гелію.	2	№ 2–3 додаткова №3
Тема 2.2	Метод молекулярних орбіталей. Метод валентних зв'язків. Порівняння та застосування. Супряжені системи.	4	№ 1–2 додаткова №1
Тема 2.3.	Групи симетрії молекул. Теорія груп, її застосування.	4	№ 1–3 додаткова №2-3
<b>Всього годин</b>		<b>24</b>	–

### Тематика самостійної роботи

№ Теми	Тема самостійної роботи	Кількість годин	Рекомендована література (№ з переліку)
1	2	3	4
Тема 1.1	Теорія Планка, модель атома та досліди Резерфорда, теорія Бора.	8	№1, 2, додаткова №1,3
Тема 1.2	Розв'язання диференціальних рівнянь. Детермінанти. Закон збереження енергії. Потенційна енергія для 1D, 2D, 3D ГО. Формалізм Лагранжа.	8	№1-3, додаткова №2,3
Тема 1.3	Вимоги до хвильової функції, ймовірнісний сенс квадрата хвильової функції. Математичне очікування.	8	№1,2, додаткова №2,3
Тема 1.4	Фотоефект, ефект Комптона, електронно-позитронні пари, античастинки. Атоми лужних металів.	10	№1-3, додаткова №2,3
Тема 1.5	Векторна модель Рассела-Саундерса. Закони збереження та квантові числа.	10	№1-3, додаткова №2,3
Тема 2.1	Алгоритми розрахунків за СУП.	8	№1-3, додаткова №2,3
Тема 2.2	Хімічний зв'язок у координаційних сполуках.	8	№1-3, додаткова

			№2,3
Тема 2.3	Застосування теорії груп до координаційних сполук. Теорема Яна-Теллера.	10	№ 1,2, додаткова №4
Тема 2.4	Методи та програми комп'ютерної квантової хімії.	16	№1,3, додаткова №1-4
<b>Всього</b>		<b>86</b>	

## 5. Схема формування оцінки.

### 5.1 Шкала відповідності оцінювання:

Відмінно/Excellent	Зараховано/Passed	90-100
Добре/Good		82-89
Задовільно/Satisfactory		75-81
Незадовільно/Fail		64-74
	Не зараховано/Fail	60-63
		0-59

### 5.2 Форми та організація оцінювання:

#### Поточний контроль:

#### 3 семестр

Форма оцінювання	Строки проведення оцінювання (тижні викладання)	Максимальна кількість балів
Перевірка поточного тестового опитування за питаннями теоретичної підготовки та самостійної роботи	2, 4, 6, 10, 12, 14	18 балів: 6 тестових опитувань 1 тест – 3 бали, 0,5 б за пункт
Перевірка домашніх завдань за індивідуальними варіантами	15	14 балів: 1 завдання; 1 завдання – 7 пунктів, по 2 б. за пункт
КМР	16	20 балів 10 завдань по 2 бали
Доповідь на обрану тему для перевірки засвоєння самостійної роботи	Протягом семестру	8 балів: 5 бали – зміст доповіді 3 бали – оформлення презентації
<b>Максимальна кількість балів за поточне оцінювання</b>		<b>60</b>

\*Якщо навчальним планом не передбачені практичні чи лабораторні заняття, готується та форма занять, яка міститься в плані

#### Семестровий контроль:

#### 3 семестр

Форма оцінювання	Максимальна кількість балів
Екзамен	40

### 5.3 Критерії оцінювання:

<b>Критерії оцінювання знань здобувачів*</b>
<b>Поточне тестове опитування</b>

<p>враховується:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– володіння поточним лекційним матеріалом та матеріалом, що потребує самостійного опрацювання;</li> <li>– осмислення та розуміння поставлених запитань;</li> <li>– вміння аналізувати та оцінювати зв'язок між фактами, інтерпретувати схеми, графіки, діаграми тощо.</li> </ul>	
<b>Бали</b>	<b>Критерій</b>
0 балів «незадовільно»	Здобувач не проходив тестування або не надав жодної правильної відповіді.
0,5-1 балів «незадовільно»	Здобувач вірно відповів на 1-2 запитання.
1,5–2 бали «задовільно»	Здобувач вірно відповів на 3-4 запитання.
2,5 бали «добре»	Здобувач вірно відповів на 5 запитання.
3 бали «відмінно»	Здобувач вірно відповів на 6 запитань.
<b>Домашні завдання за індивідуальними варіантами</b>	
<p>враховується:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– правильність розрахунків, логічність та економність розв'язання задач;</li> <li>– повнота, логічність та обґрунтованість розкриття теоретичних питань;</li> <li>– володіння лекційним матеріалом та матеріалом, що потребує самостійного опрацювання;</li> <li>– оформлення завдання.</li> </ul>	
<b>Бали</b>	<b>Критерій</b>
0 балів «незадовільно»	Здобувач не надає жодного варіанта домашньої роботи.
1-4 бали «незадовільно»	Здобувач надає 1-2 вірно розв'язаних задачі або коректних відповідей на теоретичні запитання, або частково вірних відповідей на 3-4 завдань.
5-8 балів «задовільно»	Здобувач надає 3-4 вірно розв'язаних задачі або коректних відповідей на теоретичні запитання, або частково вірних відповідей до 4-6 завдань.
9-12 балів «добре»	Здобувач надає 5-6 вірно розв'язаних задачі або коректних відповідей на теоретичні запитання, або частково вірних відповідей до 6-7 завдань.
13-14 балів «відмінно»	Здобувач надає усі вірно розв'язані задачі та коректні відповіді на теоретичні запитання; припустимі деякі недбалості оформлення.
<b>КМР</b>	
<p>враховується:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– володіння поточним лекційним матеріалом та матеріалом, що потребує самостійного опрацювання;</li> <li>– осмислення та розуміння поставлених запитань;</li> <li>– коректність розв'язків задач;</li> <li>– вміння аналізувати та оцінювати зв'язок між фактами, інтерпретувати схеми, графіки, діаграми тощо.</li> </ul>	
<b>Бали</b>	<b>Критерій</b>
0 балів «незадовільно»	Здобувач не проходив КМР або не надав жодної правильної відповіді.
1-6 бали «незадовільно»	Здобувач вірно виконав 1-3 або частково 4-5 завдань.
7-12 балів «задовільно»	Здобувач вірно виконав 4-6 або частково 6-8 завдань.
13-18 бали «добре»	Здобувач вірно виконав 7-9 або частково 8-10 завдань.
19-20 балів	Здобувач вірно або з невеликими помилками виконав 10 завдань.

«відмінно»	
<b>Доповідь на обрану тему для перевірки засвоєння самостійної роботи</b>	
враховується:	
<ul style="list-style-type: none"> <li>– володіння матеріалом теми, що потребує самостійного опрацювання;</li> <li>– осмислення та розуміння поставлених запитань;</li> <li>– логічність та послідовність викладання теми;</li> <li>– відповідність ілюстративного матеріалу змісту доповіді, охайність оформлення.</li> </ul>	
<b>Критерій</b>	
0 балів «незадовільно»	Здобувач не надав презентацію і не підготував доповідь
1-3 бали «незадовільно»	Здобувач надав неповне розкриття заданої теми, не відповідає на запитання за нею, презентація частково відповідає доповіді, неохайно оформлена
3-5 бали «задовільно»	Здобувач надав неповне розкриття заданої теми, не відповідає більшість запитань за нею, презентація відповідає або частково відповідає доповіді.
6-7 бали «добре»	Здобувач надав досить повне розкриття заданої теми, але відповідає не на всі запитання за нею, презентація відповідає доповіді, охайно оформлена
8 балів «відмінно»	Здобувач надав повне розкриття заданої теми і відповідає на всі запитання за нею, презентація відповідає доповіді, охайно оформлена.
<b>Екзамен</b>	
враховується:	
<ul style="list-style-type: none"> <li>– ступінь глибини розуміння та засвоєння досліджуваного питання;</li> <li>– дотримання принципів академічної доброчесності;</li> <li>– вміння користуватися хімічною мовою;</li> <li>– здатність узагальнювати отримані знання;</li> <li>– вміння розв'язувати задачі;</li> <li>– здатність до логічного мислення</li> </ul>	
<b>Бали</b>	<b>Критерій</b>
0-23 балів «незадовільно»	Не володіє навчальним матеріалом, не розуміє змісту теоретичного питання та умови задач
24-28 балів «задовільно»	Частково володіє навчальним матеріалом, не в змозі відповісти на більшу частину теоретичних питань та не надає детальний розв'язок задач
29-35 балів «добре»	В цілому володіє навчальним матеріалом, відповідає на більшу частину теоретичних питань, допускаючи при цьому окремі суттєві неточності та помилки у розрахункових завданнях
36-40 балів «відмінно»	Повно володіє навчальним матеріалом, правильно відповідає на всі теоретичні питання та розрахункові задачі

## **6. Методи навчання, інструменти, обладнання та програмне забезпечення, використання яких передбачає навчальна дисципліна:**

Методи навчання:

інтерактивне навчання (активне залучення здобувача вищої освіти до навчального процесу під час дискусій, бесід);

- словесні методи (пояснення);

- наочні методи (презентації);

- методи аналітичного та критичного мислення – інтелектуальна діяльність здобувача, спрямована на вирішення конкретного завдання, а також спосіб підходу до проблеми, що дозволяє виявити приховані проблеми і прийняти правильне рішення;
- самостійне навчання (опанування питань для самостійної роботи в результаті аналізу та переосмислення рекомендованої навчальної та наукової літератури).

Інструменти та обладнання:  
ПК

Програмне забезпечення:  
MS Office 365, MS Teams, MS Forms, MS PowerPoint.

## 7. Рекомендована література:

### *Основна:*

1. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. -Харків: Гімназія, 2008.-443 с.
2. Яцимирський, К.Б., Яцимирський В.К. Хімічний зв'язок. - К.: Вища школа, 1993.-309 с.
3. Яцимирський В.К., Яцимирський. А.В. Квантова хімія: підручник. –К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2009. –479с.

### *Додаткова:*

1. Richard Bader. Atoms in Molecules: A Quantum Theory. — USA: Oxford University Press, 1994.
2. Szabo A., Ostlund N. Modern Quantum Chemistry: Intro to Advanced Electronic Structure Theory. — Dover, 1996. — 481 p.
3. Levine I. N. Quantum Chemistry. — 7th ed. — Pearson, 2014. — 714 p
4. Coosky A. Physical Chemistry: Quantum Chemistry and Molecular Interactions. — Pearson, 2014. — 603 с.

## 8. Інформаційні ресурси:

1. <https://repo.knmu.edu.ua/bitstream/123456789/16419/1/%D0%9A%D0%B2%D0%B0%D0%BD%D1%82%20%D0%A5%D1%96%D0%BC%D1%96%D1%8F%20%D0%BC%D0%BE%D0%BD%D0%BE%D0%B3%D1%80%D0%B0%D1%84%20%D0%BE%D0%BA%D0%BE%D0%BD%D1%87%D0%B0%D1%82%D0%B5%D0%BB%D1%8C%D0%BD%D0%B0%D1%8F.pdf>
2. [www-chemistry.univer.kharkov.ua/](http://www-chemistry.univer.kharkov.ua/)
3. [https://physchem.knu.ua/posibniki/Kvantova\\_khimiya\\_Yatsymyrskyy.pdf](https://physchem.knu.ua/posibniki/Kvantova_khimiya_Yatsymyrskyy.pdf)
4. <https://www.nas.gov.ua/EN/Book/Pages/default.aspx?BookID=0000004111>