

ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»
Навчально-науковий інститут хімії та екології
Кафедра неорганічної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Директор ННІ хімії та екології

проф. Василь ЛЕНДЄЛ

«27» серпня 2023 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
«КВАНТОВА МЕХАНІКА І КВАНТОВА ХІМІЯ»

Рівень вищої освіти	перший
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	102 Хімія
Освітня програма	Хімія
Статус дисципліни	обов'язкова
Мова навчання	українська

Ужгород – 2023

Робоча програма навчальної дисципліни «**Квантова механіка і квантова хімія**» для здобувачів першого рівня вищої освіти галузі знань **10 Природничі науки** спеціальності **102 Хімія** освітньої програми **Хімія**

Розробники: Сабов Мар'ян Юрійович, доцент, кандидат хімічних наук, доцент кафедри неорганічної хімії ДВНЗ «Ужгородський національний університет»

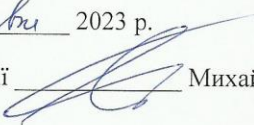
Робочу програму розглянуто та затверджено на засіданні кафедри неорганічної хімії

протокол № 12 від «13» листопада 2023 р.

Завідувач кафедри  Ігор БАРЧІЙ

Схвалено науково-методичною комісією Навчально-наукового інституту хімії та екології

протокол № 10 від «26» червня 2023 р.

Голова науково-методичної комісії  Михайло СЛИВКА

© _____ 20__ р.

© ДВНЗ «Ужгородський національний університет 20__ р.

Найменування показників	Розподіл годин за навчальним планом	
	Денна форма навчання	Заочна форма навчання
Кількість кредитів ЄКТС – 3	Рік підготовки	
Загальна кількість годин – 90	III	
Кількість модулів – 2	Семестр:	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 2,5	5	
	Лекції:	
	28	
	Практичні (семінарські):	
	16	
Вид підсумкового контролю: екзамен	Лабораторні:	
Форма підсумкового контролю: усна	Самостійна робота:	
	46	

2. МЕТА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Метою вивчення навчальної дисципліни «Квантова механіка і квантова хімія» є формування уявлень про теоретичні методи, якими вивчають електронну будову атомів та молекул, що є предметом квантової хімії і здійснюється методами квантової механіки - теорією, що описує рух та специфічні властивості мікроскопічних тіл (в тому числі електронів, атомів, молекул) властивості яких суттєво відрізняються від макротіл.

Відповідно до освітньої програми, вивчення дисципліни сприяє формуванню у здобувачів вищої освіти таких компетентностей:

Загальні компетентності (ЗК):

ЗК 1 – здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу,

ЗК 2 – здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями;

ЗК 11. Здатність бути критичним і самокритичним;

Фахові компетентності (ФК):

ФК 1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії;

ФК 2 – здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії;

ФК 4 – здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.

3. ПЕРЕДУМОВИ ДЛЯ ВИВЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Передумовами вивчення навчальної дисципліни «Квантова механіка і квантова хімія» є опанування таких навчальних дисциплін (НД) освітньої програми (ОП):

Шифр НД за ОП	Назва навчальної дисципліни
ОК 6	Вища математика
ОК 7	Фізика
ОК 8	Обчислювальна техніка і основи програмування
ОК 11	Неорганічна хімія
ОК 13	Кристалохімія

4. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Відповідно до освітньої програми **102 «Хімія»**, вивчення навчальної дисципліни повинно забезпечити досягнення здобувачами освіти таких програмних результатів навчання (ПРН):

Програмні результати навчання	Шифр ПРН
Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.	ПРН 5
Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул, хімічного зв'язку.	ПРН 7
Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.	ПРН 16

Очікувані результати навчання, які повинні бути досягнуті здобувачами освіти після опанування навчальної дисципліни «Квантова механіка і квантова хімія»:

Очікувані результати навчання з дисципліни	Шифр ПРН
Вміти встановлювати взаємозв'язок між будовою та властивостями речовин.	ПРН 5
Вміти застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул, хімічного зв'язку.	ПРН 7
Розуміти алгоритм проведення комп'ютерного обчислення із використанням спеціального програмного забезпечення.	ПРН 16

5. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Засоби оцінювання та методи демонстрування результатів навчання

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання з навчальної дисципліни є:

- поточний контроль успішності,
- модульний контроль,
- підсумковий контроль.

Форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання

Форми поточного контролю:

- вибіркове усне опитування перед початком занять;
- фронтальне стандартизоване усне та/або письмове опитування за основними питаннями теми заняття;
- експрес-опитування;
- тестування;
- реферативні повідомлення та їх обговорення;
- оцінювання якості та повноти виконання завдань модульної контрольної роботи.

Форми модульного контролю: поточний контроль та виконання модульної контрольної роботи, результати якої оцінюються за 50-бальною шкалою за кожний модуль.

Форми підсумкового семестрового контролю: екзамен (5-й семестр). До екзамену допускаються студенти, які відпрацювали пропущені заняття і виконали модульні контрольні роботи.

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 1)

Поточне оцінювання та самостійна робота				Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4	50	100
12.5	12.5	12.5	12.5		

T1, T2 ... – теми

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 2)

Поточне оцінювання та самостійна робота				Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4	50	100
12.5	12.5	12.5	12.5		

T1, T2 ... – теми

Оцінювання окремих видів навчальної роботи з дисципліни

Вид діяльності здобувача вищої освіти	Модуль 1		Модуль 2	
	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)
Практичні (семінарські) заняття	4	10	4	10
Лабораторні заняття (допуск, виконання та захист)				
Комп'ютерне тестування при тематичному оцінюванні				
Письмове тестування при тематичному оцінюванні	2	40	2	40
.....				
Презентація				
Реферат				
Есе				
.....				
Модульна контрольна робота		50		50
Разом		100		100

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи

Модульна контрольна робота здійснюється у письмовій формі шляхом відповідей на питання тестових завдань. Кожна правильна відповідь оцінюється певною кількістю балів. Максимальна кількість балів за кожний модуль становить 100 балів.

Критерії оцінювання курсової роботи (проекту) (у разі потреби)

Критерії оцінювання підсумкового семестрового контролю

Підсумковий семестровий контроль з дисципліни «Квантова механіка і квантова хімія» здійснюється у виді екзамену. Екзамен проводиться в усній формі шляхом співбесіди. Результати екзамену оцінюються за відповідною шкалою ЄКТС.

Підсумкова оцінка визначається наступними критеріями:

- "відмінно" А (90-100) - якщо студент повно та ґрунтовно засвоїв всі теми навчальної програми вміє вільно та самостійно викласти зміст всіх питань програми навчальної дисципліни, розуміє її значення для своєї професійної підготовки, повністю виконав усі завдання кожної теми та поточного модульного контролю в цілому;

- "добре" В (82-89) - якщо студент недостатньо повно та ґрунтовно засвоїв окремі питання робочої програми. Вміє самостійно викласти зміст основних питань програми навчальної дисципліни, виконав завдання кожної теми та модульного поточного контролю в цілому;

- "добре" С (74-81) - якщо студент недостатньо повно та ґрунтовно засвоїв деякі теми робочої програми, не вміє самостійно викласти зміст деяких питань програми навчальної дисципліни. Окремі завдання кожної теми та модульного поточного контролю в цілому виконав не повністю;

- "задовільно" D (64-73) - якщо студент засвоїв лише окремі теми робочої програми. Не вміє вільно самостійно викласти зміст основних питань навчальної дисципліни, окремі завдання кожної теми модульного контролю не виконав;

- "задовільно" Е (60-63) - якщо студент засвоїв лише окремі питання навчальної програми. Не вміє достатньо самостійно викласти зміст більшості питань програми навчальної дисципліни. Виконав лише окремі завдання кожної теми та модульного контролю в цілому;

- "не задовільно" Fx (35-59) - якщо студент не засвоїв більшості тем навчальної програми не вміє викласти зміст більшості основних питань навчальної дисципліни. Не виконав більшості завдань кожної теми та модульного контролю в цілому;

- "не задовільно" Fx (35-59) - якщо студент не засвоїв навчальної програми, не вміє викласти зміст кожної теми навчальної дисципліни, не виконав модульного контролю.

За бажанням студента результуюча підсумкова оцінка може бути визначена як інтегрована оцінка засвоєння всіх тем дисципліни і кількісно дорівнює середньому арифметичному балів, отриманих за кожний модуль.

Переведення результатів, отриманих за 100-бальною шкалою оцінювання в національну 4-х бальну та шкалу за системою ECTS здійснюється за наступною схемою:

Оцінка за шкалою балів	Залік	ECTS	
		Оцінка	Характеристика
90 та вище	зараховано	A	відмінно
82-89	зараховано	B	добре
74-81	зараховано	C	добре
64-73	зараховано	D	задовільно
60-63	зараховано	E	задовільно
35-59	незараховано	FX	незадовільно з можливістю перескладання
1-34	незараховано	F	незадовільно з обов'язковим повторним навчанням

Студент, який отримав за результатами підсумкового контролю оцінку «незараховано» (1-34 балів, F), зобов'язаний пройти повторний курс вивчення дисципліни (під час додаткового семестру) і скласти залік.

Результати підсумкового контролю знань заносяться до залікової відомості.

6. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

6.1. Зміст навчальної дисципліни

Модуль 1. Основи квантової механіки.

Тема 1. Становлення квантової теорії. (4 год.)

Предмет та завдання квантової механіки і квантової хімії. Фізичні основи квантової теорії. Електромагнітне випромінювання та його характеристики. Шкала електромагнітного випромінювання. Випромінювання абсолютно чорного тіла. Дискретний характер енергії. Формула Планка. Корпускулярно-хвильовий дуалізм електромагнітного випромінювання. Зовнішній фотоефект. Фотони. Тормозне рентгенівське випромінювання. Дослід Боте. Ефект Комптона.

Тема 2. Теорія атома гідрогену Бора. (2 год.)

Ядерна модель атома. Спектральні закономірності атому. Постулати Бора. Борівська модель атома гідрогену. Діаграма енергетичних рівнів атома гідрогену. Досліди Франка і Герца.

Тема 3. Теоретичні основи квантової механіки. (6 год.)

Хвильові властивості частинок. Гіпотеза де Бройля. Експериментальні докази гіпотези де Бройля. Принцип доповнюваності Бора. Принцип невизначеності Гейзенберга. Виміри у класичній і квантовій механіці. Інтерпретація невизначеностей. Принцип Гейзенберга як фундаментальний закон природи. Постулати квантової механіки. Опис стану фізичної системи у класичній та квантовій механіці. Хвильова функція та його властивості. Умова нормування. Теорема про не взаємодію. Поняття оператора та її властивості. Власні функції і власні значення операторів. Оператори спостережуваних фізичних величин. Нестационарне рівняння Шредінгера. Стационарний стан і його властивості. Стационарне рівняння Шредінгера. Принцип суперпозиції. Імовірності результатів вимірювання спостережуваних фізичних величин їх середні значення.

Тема 4. Модельні одночастинкові задачі. (4 год.)

Частинка в одно-, дво-, трьохвимірному потенціальному ящику. Вільний рух електрону. Розв'язання рівняння Шредінгера для частинки у потенціальному ящику. Інтерпретація квантового числа. Діаграма енергетичних рівнів. Хвильові функції, їх вузлові властивості і графічне зображення. Модель вільного електрону у структурі спряжених лінійних вуглеводнів. Потенціальна сходінка та бар'єр. Коефіцієнт проходження та коефіцієнт відбиття. Тунельний ефект та надбар'єрне відбивання. Особливості енергетичного спектра і хвильових функцій осцилятора.

Модуль 2. Основи квантової хімії.

Тема 1. Задача про гідрогеноподібний атом. (2 год.)

Поділ змінних у рівнянні Шредінгера для гідрогеноподібний атом. R-, θ - та Φ -рівняння. Радіальні та кутові хвильові функції. Хвильові функції електрона у гідрогеноподібному атомі. Атомні орбіталі, їх позначення, властивості та способи графічного зображення. Головне квантове число й енергія електрона у гідрогеноподібному атомі. Орбітальне та магнітне квантові числа. Магнітний момент електрону в атомі. Досліди Штерна і Герлаха. Власний кутовий момент електрону. Спінове квантове число.

Тема 2. Опис багатоелектронної системи. (4 год.)

Правила заповнювання електронних орбіталей. Взаємозв'язок між електронною конфігурацією та періодичною системою атомів хімічних елементів. Векторна модель атому. Поняття про терми та мультиплетність. Метод Рассела – Саундерса, терми Рассела –

Саундерса. Правила Гунда. Розрахунок основних атомних термів методом Рассела – Сандерса, правило інтервалів Ланде, правило електронно - діркового формалізму, розрахунок повної системи атомних термів, спектри лужних металів, розрахунок енергії терма. Вплив зовнішнього поля: зняття виродження і розщеплення енергетичних рівнів.

Тема 3. Опис стану двохатомних молекул. (2 год.)

Двохатомні іонні молекули. Ковалентні й полярні двохатомні молекули згідно методу валентних зв'язків. Опис двохатомних молекул методом молекулярних орбіталей. Уточнені розрахунки, порівняння методів молекулярних орбіталей і валентних зв'язків.

Тема 4. Опис стану багатоатомних молекул. (4 год.)

Особливості опису багатоатомних молекул методом валентних зв'язків. Основи симетрії молекул. Молекулярні орбіталі в молекулах AB_n . Багатоатомні молекули з кратними зв'язками. Спектральні характеристики молекул. Розрахункові моделі квантової хімії.

6.2. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Форма навчання:					
	Усього	у тому числі				
лекції		практичні (семінарські)	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота	
4-й семестр						
Модуль 1						
Тема 1. Становлення квантової механіки.	14	4	2			8
Тема 2. Теорія атома гідрогену Бора.	10	2	2			6
Тема 3. Теоретичні основи квантової механіки.	16	6	4			6
Тема 4. Модельні одночастинкові задачі.	10	4				6
Модульна контрольна робота						
Разом за модуль	50	16	8			26
Модуль 2						
Тема 1. Задача про гідрогенподібний атом.	10	2	2			6
Тема 2. Опис багатоелектронної системи.	12	4	2			6
Тема 3. Опис стану двохатомних молекул.	8	2	2			4
Тема 4. Опис стану багатоатомних молекул.	10	4	2			4
Модульна контрольна робота						
Разом за модуль	40	12	8			20
Разом за семестр	90	28	16			46

6.3. Теми практичних (семінарських, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денна	заочна
1	Передумови виникнення квантової механіки.	2	
2	Модель атома гідрогену Бора. Атомні спектри.	2	
3	Теоретичні основи квантової механіки. Хвилі де Бройля. Принцип невизначеності Гейзенберга.	2	
4	Постулати квантової механіки.	2	
5	Гідрогенподібна модель атому.	2	
6	Атомні терми. Векторна модель атому.	2	
7	Опис двохатомних молекул.	2	
8	Опис багатоатомних молекул.	2	
	Разом	16	

6.4. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денна	заочна
1	Електромагнітне випромінювання та його характеристики. Шкала електромагнітного випромінювання.	2	
2	Корпускулярно-хвильовий дуалізм електромагнітного випромінювання. Явище фотоелектру та Комптона.	6	
3	Ядерна модель атома. Спектральні закономірності атому.	2	
4	Опис стану атому гідрогену в теорії Бора.	4	
5	Хвильові функції, їх вузлові властивості і графічне зображення.	2	
6	Постулати квантової механіки	4	
7	Заряджена частинка в потенціальному полі	4	
8	Надбар'єрне відбивання та тунельний ефект.	2	
9	Атомні орбіталі, їх позначення, властивості та способи графічного зображення.	4	
10	Квантові числа.	2	
11	Правила заповнення орбіталей багатоелектронного атому.	6	
12	Квантово хімічний розгляд ковалентного зв'язку методом валентних зв'язків.	4	
13	Основні положення методу молекулярних орбіталей.	4	
	Разом	46	

6.5. Індивідуальні завдання (у разі потреби)

7. ІНСТРУМЕНТИ, ОБЛАДНАННЯ ТА ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ, ВИКОРИСТАННЯ ЯКИХ ПЕРЕДБАЧАЄ НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА (у разі потреби)

Технічні засоби: мультимедійний проектор

Обладнання: ПК.

Програмне забезпечення: Windows 10, MOODLE, Google Meet.

8. РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА ІНФОРМАЦІЇ

Основна література

1. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. -Харків: Гімназія, 2008.-443 с.
2. Квантова хімія: підручник / В.К.Яцимирський, А.В.Яцимирський. –К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2009. –479с.

Допоміжна література

1. К.Б. Яцимирський, В.К. Яцимирський Хімічний зв'язок. - К.: Вища школа, 1993.-309 с.

Інформаційні ресурси в мережі Інтернет

1. <https://cosmolearning.org/courses/quantum-chemistry-spectroscopy/>
2. <https://cosmolearning.org/courses/introduction-quantum-chemistry-prof-k-mangala-sunder/>

**Результати перегляду
робочої програми навчальної дисципліни**

Робоча програма перезатверджена на 20 __/20__ н.р. без змін; зі змінами (Додаток __)
(потрібне підкреслити)

протокол № __ від «__» _____ 20__ р. Завідувач кафедри _____ (І.Є.Барчій)

Робоча програма перезатверджена на 20 __/20__ н.р. без змін; зі змінами (Додаток __)
(потрібне підкреслити)

протокол № __ від «__» _____ 20__ р. Завідувач кафедри _____ (І.Є.Барчій)

Робоча програма перезатверджена на 20 __/20__ н.р. без змін; зі змінами (Додаток __)
(потрібне підкреслити)

протокол № __ від «__» _____ 20__ р. Завідувач кафедри _____ (І.Є.Барчій)

Робоча програма перезатверджена на 20 __/20__ н.р. без змін; зі змінами (Додаток __)
(потрібне підкреслити)

протокол № __ від «__» _____ 20__ р. Завідувач кафедри _____ (І.Є.Барчій)