


Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету
“27” серпня 2020 року, протокол №8

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Токарев Віктор Володимирович, старший викладач кафедри прикладної хімії
Кравченко Олексій Андрійович, к.х.н., доцент кафедри прикладної хімії

Програму схвалено на засіданні кафедри прикладної хімії
“27” серпня 2020 року, протокол №1

Завідувач кафедри прикладної хімії


(підпис) Чебанов В. А.
(прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньої (професійної/наукової) програми (керівником
проектної групи) Біоспізика
назва освітньої програми

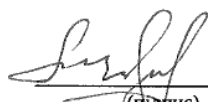
Гарант освітньої (професійної/наукової) програми
(керівник проектної групи) _____


(підпис) Берест П.
(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією
радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем
назва факультету, для здобувачів вищої освіти якого викладається навчальна дисципліна

Протокол від “17” серпня 2020 року № 6

Голова методичної комісії _____


(підпис) Черныш І. П.
(прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Квантова хімія” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки другого рівня вищої освіти – магістр спеціальності 105 «прикладна фізика та наноматеріали».

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є формування уявлення про методи, за допомогою яких розраховують електронну будову атомів та молекул, сформувані вміння самостійно розраховувати електронну будову молекулярних систем з використанням сучасних квантово-хімічних обчислювальних програм, вміння оцінювати адекватність використаних квантово-хімічних методів.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни:

- ознайомлення з основами квантової теорії атомів і молекул;
- опанування основних розрахункових методів сучасної квантової хімії;
- набуття практичних навичок у розрахунках та тлумаченні електронної будови і спектральних характеристик молекулярних структур;
- розв’язання практичних завдань щодо розрахунків, пов’язаних з актуальними проблемами біохімії та біофізики.

1.3. Кількість кредитів: **6**.

1.4. Загальна кількість годин: **180**.

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна / за вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
1-й	-
Семестр	
1-й	-
Лекції	
32 год.	-
Практичні, семінарські заняття	
16 год.	-
Лабораторні заняття	
-	-
Самостійна робота	
132 год.	-
Індивідуальні завдання	
0 год.	

1.6. Заплановані результати навчання

Студенти володіють теоретичними основами квантової теорії атомів та молекул, напівемпіричних та неемпіричних методів квантової хімії. Студенти розуміють основні припущення, розрахункову складність та недоліки розглянутих методів квантової хімії.

Студенти вміють застосовувати основи математичного апарату квантової механіки до розв’язання модельних задач квантової хімії, а також вміти зробити фізико-хімічні висновки з отриманих результатів.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Основи квантової механіки молекул

Тема 1. Квантова механіка атомів. Атом водню. Атомні орбіталі, їх позначення, властивості, графічне зображення. Воднеподібний атом. Властивості хімічних елементів та періодична таблиця хімічних елементів. Правило Маделунга. Вплив релятивістських ефектів на атомні орбіталі, їх енергію та властивості елементів. Векторна модель атома. Атомні терми в наближенні L-S зв'язку. Правила відбору для електронних переходів в атомах.

Тема 2. Основи квантової теорії молекул. Молекулярний гамільтоніан. Наближення Борна-Оппенгеймера та електронний гамільтоніан. Вібронні стани. Ефект Яна-Теллера. Перехід Паєрлса. Методи розрахунку коливального спектру молекул. Двохатомна молекула у наближенні гармонічного осцилятора. Потенціал Леннард-Джонса та ангармонічний осцилятор.

Тема 3. Електронна будова двоатомних молекул. Електронне рівняння Шредінгера для молекулярного іону водню. Наближення МО ЛКАО. Орбітальні енергії. Інтеграл перекриття. Кулонівський та резонансний інтегралі. Якісний аналіз станів двохатомних молекул. Енергетична діаграма МО. Опис властивостей двохатомних молекул.

Тема 4. Хімічний зв'язок. Поняття хімічного зв'язку. Типи хімічних зв'язків. Трьохцентровий хімічний зв'язок. Гібридизація атомних орбіталей та геометрія молекул. Електронегативність. Порядок зв'язку. Кореляція між порядком та довжиною зв'язку. Електронна та спінова густина. Індокси реакційної здатності. Теорія атомів в молекулах.

Розділ 2. Основні методи квантової хімії

Тема 5. Основи розрахункових методів квантової хімії. Типи базисних наборів. Похибка суперпозиції базисного набору. Варіаційний метод, метод лінійних комбінацій Релея-Рітца. Теорія збурень. Теорія середнього поля. Метод Монте-Карло та проблема знаку в системах ферміонів. Оптимізація геометрії молекул. Метод повної та часткової конфігураційної взаємодії.

Тема 6. Методи самоузгодженого поля. Метод Гартрі-Фока та його різновиди. Рівняння Рутаана та пряма мінімізація одночастинкової частинки густини. Теорема Купманса. Теорема Бріллюена. Теорія Томаса-Фермі. Теорія функціоналу густини. Теорема Хоенберга-Кона. Рівняння Кона-Шема. Типи обмінно-кореляційних функціоналів. Переваги та недоліки теорії функціоналу густини.

Тема 7. Напівемпіричні методи квантової хімії. Проблема обчислювання інтегралів міжелектронного відштовхування. Наближення нульового диференційного перекриття. Ієрархія напівемпіричних методів квантової хімії. Основні ідеї та припущення простого та розширеного методу Хюккеля. Електронна будова спряжених вуглеводнів. Альтернантні та неальтернантні спряжені вуглеводні. Ароматичність та антиароматичність. Правило Хюккеля для ануленів. Ароматичність Мебіуса.

Тема 8. Електронна кореляція. Неемпіричні методи квантової хімії. Електронна кореляція. Ефекти електронної кореляції в сполуках перехідних металів. Модель Хаббарда. Перехід Мотта. Методи повної та часткової конфігураційної взаємодії. Теорія збурень Мелера-Плесета. Метод зв'язаних кластерів. Метод валентних зв'язків. Теорія резонансу.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	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. Основи квантової механіки молекул												
Тема 1	16	4	2			17						
Тема 2	16	4	2			16						
Тема 3	21	4	2			17						
Тема 4	22	4	2			16						
Разом за розділом 1	75	16	8			66						
Розділ 2. Основні методи квантової хімії												
Тема 5	16	4	2			17						
Тема 6	16	4	2			16						
Тема 7	21	4	2			17						
Тема 8	22	4	2			16						
Разом за розділом 2	75	16	8			66						
Усього годин	180	32	16			132						

4. Теми семінарських (практичних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Атомні терми Расела-Саундерса (наближення L-S зв'язку). Правила відбору для електронних переходів в атомах.	2
2	Розрахунок коливальних спектрів двоатомних молекул у ангармонічному наближенні. Розрахунок коливальних спектрів малих молекул та простих полімерів в гармонічному наближенні.	2
3	Якісний аналіз станів двоатомних молекул. Енергетична діаграма МО. Електронні властивості двоатомних молекул.	2
4	Хімічний зв'язок в двоатомних молекулах. Розрахунок порядку зв'язку, зарядів та спінової густини на атомах.	2
5	Розрахунок енергії іонізації, спорідненості до електрона та інших властивостей атомів, іонів та малих молекул методом повної конфігураційної взаємодії.	2
6	Розрахунок електронної структури атомів, іонів та малих молекул за допомогою методів Гартрі-Фока та теорії функціоналу густини.	2
7	Розрахунки енергетичного спектру, розподілу зарядів у основному та збуджених станах модельних π -електронних структур у рамках методу Хюккеля.	2
8	Порівняння результатів розрахунків з використанням різних квантово-хімічних методів. Розрахунки властивостей моделі Хаббарда для малих молекул.	2
	Разом	16

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Визначення символів термів Рассела-Саундерса для атомів з електронною конфігурацією з мінімальною енергією. Визначення допустимих електронних конфігурацій для даного атомного терма. Застосування правил відбору для електронних переходів: електричного та магнітного дипольного та квадрупольного.	17
2	Знаходження власних значень та хвильових функцій квантового ангармонічного осцилятора. Розрахунки частот основного переходу та обертонів квантового ангармонічного осцилятора, визначення сталої ангармонічності.	16
3	Зрозуміти, в чому полягає наближення МО ЛКАО. Зрозуміти, що зображує та як побудувати енергетичну діаграму МО для двоатомної та триатомної молекули.	17
4	Зрозуміти зв'язок між гібридизацією атомних орбіталей та геометрією молекул, зв'язок між відносною енергією валентних орбіталей та їх гібридизацією. Розглянути кореляцію між порядком хімічного зв'язку та його довжиною. Зрозуміти, як можна використовувати електронну та спінову густину та індекси реакційної здатності для висунання припущень щодо механізму хімічних перетворень. Розглянути застосування теорії атомів в молекулах.	16
5	Обчислення матричних елементів електронного гамільтоніана. Правила Слейтера-Кондона. Вироджена теорія збурень	17
6	Застосування RHF, UHF та DFT для опису міжмолекулярних взаємодій на прикладах асоціатів молекул із різними міжмолекулярними взаємодіями у різних базисах.	16
7	Визначення енергій основного та першого збудженого стану, спінової та зарядової густини на атомах спряженої π -електронної системи за допомогою простого методу Хюккеля з використанням симетрії досліджуваної системи	17
8	Знати розрахукову складність методу повної конфігураційної взаємодії. Розуміти причини, чому методи середнього поля не можуть описати магнітні та провідні властивості сильно корельованих сполук перехідних металів. Зрозуміти механізм переходу Мотта в сильнокорельованих провідних сполуках.	16
	Разом	132

6. Індивідуальні завдання: немає

7. Методи контролю:

розв'язання задач на практичних заняттях, контрольні роботи, екзамен.

8. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання						Екзамен	Сума				
Розділ 1		Контрольна робота		Розділ 2				Контрольна робота		Індивідуальне завдання	
T1	T2	20	T5	T6	20	-	60	40	100		
2	3		2	3							
T3	T4		T7	T8							
2	3		2	3							

9. Рекомендоване методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.

Шкала оцінювання

1. Студент допускається до складання екзамену за умови виконання обох контрольних робіт та загального рейтингу не менше 30 балів.
2. Екзамен вважається зданим, якщо рейтинг за екзамен складає не менше 20 балів.
3. Несвоєчасно виконані завдання у рамках поточного контролю оцінюються в 75% від набраної рейтингової оцінки.
4. За пропуск однієї лекції без поважної причини студент втрачає 2 бали від загального рейтингу за семестр.

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

9. Рекомендована література

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.А., Іванов В.В. Квантовая химия. –Харьков: Фолио, 2007. -476 с.
3. Jensen, Frank. Introduction to computational chemistry. - New York: Wiley, 1999. - 429 pp.

Допоміжна література

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М Квантовая механика. Часть III. -М.: Наука, 1975. – 767 с.
2. Мейер И. Избранные главы квантовой химии. Доказательства теорем и вывод формул. - М.: Бином, 2006 — 384 с.
3. Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. -М.: Высш.шк.,1979. -407с.
4. Харгитаи И., Харгитаи М. Симметрия глазами химика. -М.: Мир, 1989.- 494 с.
5. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. -М.: Мир,1983.- 396с.
6. І. О. Вакарчук. Квантова механіка. - Львів: ЛНУ, 2012. - 827 с.

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

1. <http://vergil.chemistry.gatech.edu/notes/>.
2. <http://www.psicode.org/>.
3. <https://pymol.org/>.
4. <https://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/documentation.html>.