

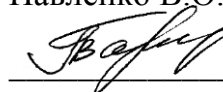
**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет

Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана/директора
з навчальної роботи
Павленко В.О.



“08” травня 2019 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
КВАНТОВА ХІМІЯ**

для студентів

галузі знань **10 Природничі науки**
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **“бакалавр”**
освітня програма **Хімія**
вид дисципліни **обов’язкова**

Форма навчання **денна**

Навчальний рік **2019/2020**

Семестр **VI**

(VI семестр програми підготовки за ОР «бакалавр»)

Кількість кредитів ECTS **4 кредити**

Мова викладання, навчання та оцінювання
українська

Форма заключного контролю **залік**

Викладач (лектор): **Яцимирський Андрій Віталійович**

Пролонговано: на **2020/2021** н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.

на **2021/2022** н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.


КИЇВ – 2019

Розробник: Яцимирський Андрій Віталійович, доц., к.х.н., доц.



ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізичної хімії

 (Фрицький І.О.)

Протокол № 7 від “09” квітня 2019 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від “08” травня 2019 року

Голова науково-методичної комісії  (Роїк О.С.)

Протокол № від “__” _____ 20__ року

Голова науково-методичної комісії _____ (_____)

1. **Мета дисципліни** – полягає в поясненні природи хімічного зв'язку за допомогою апарату квантової механіки.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни

Знати основи фізики та хімії, а також володіти необхідним математичним апаратом, включаючи інтегрування та диференціювання.

3. Анотація навчальної дисципліни

Викладаються основні підходи до квантово-хімічного описання систем та використання відповідного математичного апарату. Розглянута теорія хімічного зв'язку для дво- і багатоатомних молекул. Показано застосування теорії симетрії з елементами теорії груп для інтерпретації хімічного зв'язку в багатоатомних молекулах.

4. Завдання (навчальні цілі):

Надання студентам знань за основними напрямками квантової хімії та її застосування для квантово-хімічного опису різних систем: модельні системи, одно- і багато електронні атоми, прості та складні молекули.

Зміст курсу входить в обов'язковий мінімум професійних знань хіміка, особливо науковця. Розуміння природи виникнення хімічного зв'язку, а також розуміння основних моделей дає розуміння на чому ґрунтуються сучасні підходи хімічної науки.

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання	Форма (та/або методи і технології) викладання і навчання)	Методи оцінювання* та порогів критерій оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1. Знання				
1.1	Основні поняття та навички апарату квантової механіки, теорії симетрії, математики, фізики тощо, які задіяні в квантовій хімії.	Лекції, практичні заняття	МКР, ІР	10
2. Вміння				
2.1	користуватися поняттями атомних орбіталей	Лекції, практичні заняття	МКР, ІР	25
2.2	користуватися поняттями електронних конфігурацій	Лекції, практичні заняття	МКР, ІР	5
2.3	користуватися характеристиками атому: енергії іонізації, спорідненості до електрону, електронегативності	Лекції, практичні заняття	МКР, ІР	5
2.4	інтерпретувати походження хімічного зв'язку та пояснювати направленість хімічного зв'язку.	Лекції, практичні заняття	МКР, ІР	10

2.5	користуватися методом молекулярних орбіталей для невеликих молекул	Лекції, практичні заняття	МКР, ІР	30
3. Комунікація				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації	Лекції, практичні заняття	МКР, ІР	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	Лекції, практичні заняття	МКР, ІР	2
4. Автономність та відповідальність				
4.1	Вміти проаналізувати та інтерпретувати дані, що стосуються квантово-хімії молекул та атомів	Лекції, практичні заняття	МКР, ІР	0
4.2	Дотримуватися правил наукової етики та академічної доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації у галузі квантової хімії	Лекції, практичні заняття	МКР, ІР	8

**Модульні контрольні роботи (МКР)*

Індивідуальна робота: Усні відповіді на практичних заняттях, доповнення, співбесіди за МКР — (ІР)

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):

ПРН	РНД (код)										
	1.1	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	3.1	3.2	4.1	4.2	
Знання											
Базові методологічні знання та розуміння основ хімії та суміжних галузей знань	+	+	+	+	+	+					
Здатність розуміти та інтерпретувати основи фізики та математики на рівні, достатньому для використання їх у різних сферах хімії	+	+	+	+	+	+					
Знання хімічної термінології та номенклатури, спроможність описувати хімічні дані у символічному вигляді	+										
Знання основних типів хімічних реакцій та стереохімічних досліджень		+	+	+	+	+					
Здатність пояснити зв'язок між будовою та властивостями речовин	+	+	+	+	+	+			+		

7. Схема формування оцінки

Оцінка складається з суми балів отриманих на практичних заняттях та за модульні контрольні роботи.

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання

Модульні контрольні роботи (МКР)

Індивідуальна робота (ІР): Усні відповіді на практичних заняттях, доповнення, співбесіди за МКР.

Модульні контрольні роботи ЗМ2 та ЗМ3 складаються з 3-х частин: мінімального базового набору задач (питань) однакових для всіх студентів, практичних задач задачі на розкриття/розуміння теорії, або питання з теорії.

Модульні контрольні роботи ЗМ2 та ЗМ3 включають співбесіду щодо задачі на розкриття/розуміння теорії, або питання з теорії, та передбачає питання щодо цієї задачі або теоретичного питання, й додаткові питання на розуміння теоретичного матеріалу. Перелік теоретичних питань за модулями наведено нижче в кінці цієї програми.

Обов'язковим для отримання іспиту/заліку є написання трьох модульних контрольних.

Особливі умови:

В контрольних роботах модуль 2 та 3 необхідно розв'язати мінімальний базового набору задач (питань).

7.2. Організація оцінювання:

6 семестр

	ЗМ1		ЗМ2		ЗМ3	
	Min. – 6 балів	Max. – 10 балів	Min. – 24 балів	Max. – 40 бали	Min. – 30 балів	Max. – 50 балів
Усна відповідь	1	2	12	20	16	24
Доповнення			3	5	3	8
Модульна контрольна робота 1	5	8				
Модульна контрольна робота 2			9	15		
Модульна контрольна робота 3					11	18
"3" – мінімальна/максимальна оцінку, яку може отримати студент. ¹ – мінімальна/максимальна залікова кількість робіт чи завдань.						

Для студентів, які набрали сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум – **60** балів для одержання заліку обов'язково мають переписати модульні контрольні роботи.

Для студентів, які набрали впродовж семестру сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум для заліку або критично-розрахунковий мінімум для допуску до іспиту допускається написання реферату за темами доповіді чи самостійної роботи, за які отримана незадовільна оцінка, або перескладання колоквиуму чи МКР, за які

отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до доповіді / колоквіуму / МКР).

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

7.3. Шкала відповідності оцінок

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

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва лекції	Кількість годин		
		лекції	практичні	С/Р
<i>Змістовий модуль 1 Математична база квантової хімії</i>				
1	ТЕМА 1. Математичні основи апарату квантової механіки	2	2	6
	<i>Модульна контрольна робота</i>	1		
<i>Змістовий модуль 2 Квантова хімія атома</i>				
2	ТЕМА 2. Основні постулати квантової механіки. Апарат квантової механіки.	5	4	6
3	ТЕМА 3. Будова атома. Одноелектронна система.	4	6	8
4	ТЕМА 4. Будова атома. Двохелектронна система.	4	2	6
5	ТЕМА 5. Будова атома. Багатоелектронна система.	2	2	4
	<i>Модульна контрольна робота</i>	1		
<i>Змістовий модуль 3 Квантова хімія молекули</i>				
6	ТЕМА 6. Двохатомні молекули.	8	4	14
7	ТЕМА 7. Багатоатомні молекули.	2	10	16
	<i>Модульна контрольна робота</i>	1		
	ВСЬОГО	30	30	60

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Практичні – **30 год.**

Самостійна робота – **60 год.**

Рекомендована література.

Основна: (Базова)

1. Яцимирський В.К., Яцимирський А.В. Квантова хімія. – К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2009.-479 с.
2. Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков. Учеб.пособие.- М.: Высшая школа,1980.- 215 с.
3. Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика: Пер. с англ. - М.: Мир, 1989.- 496 с.
4. Маррел Дж., Кеттл С, Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир,1968. - 522 с.
5. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Высшая школа,1963.- 622 с.
6. Драго Р. Физические методы в химии т.1,2. М., Мир, 1981.
7. Выгодский М.Я. Справочник по высшей математике. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 1963. - 872 с.
8. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся ВТУЗов. – М.: Наука, 1964. - 608 с.
9. Бутузов В.Ф., Крутицкая Н. Ч., Шишкин А. А. Линейная алгебра в вопросах и задачах: Учеб. пособие/ Под ред. В. Ф. Бутузова. — 2-е изд., испр. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. — 248 с. — ISBN 5-9221-0285-0.

Додаткова:

10. Маррел Дж., Кеттл С, Теддер Дж. Химическая связь. М. : Мир,1980.
11. Эткинс П. Кванты. М. : Мир, 1977.
12. Коулсон Ч. Валентность. М. : Мир, 1965.
13. Хохштрассер Р. Молекулярные аспекты симметрии. М,: Мир, 1968,
14. Слетер Дж. Электронная структура молекул. М. : Мир, 1965.
15. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии,М.: Мир, 1972.
16. Р.Пирсон. Правила симметрии в химических реакциях: Пер. с англ. - М.: Мир, 1979.- 592 с.
17. Губанов В.А., Курмаев Э.З., Ивановский А.Л. Квантовая химия твердого тела. М. : Наука, 1984.
18. Дяткина М. Е. Основы теории молекулярных орбиталей. М. : Наука, 1975.
19. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М. : Наука, 1978.

В тому числі й інтернет ресурси