

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**  
**ВИБРАНІ РОЗДІЛИ ТЕОРЕТИЧНОЇ ХІМІЇ**

галузі знань  
спеціальність  
освітній рівень  
освітня програма  
вид дисципліни

для студентів  
**10 Природничі науки**  
**102 Хімія**  
**“магістр”**  
**Хімія**  
**вибіркова**

Форма навчання **денна**  
Навчальний рік **2019/2020**  
Семестр **II**  
(II семестр програми підготовки за ОР «магістр»)  
Кількість кредитів ECTS **4 кредити**  
Мова викладання, навчання та оцінювання  
**українська**  
Форма заключного контролю **залік**

Викладачі (лектори): **Яцимирський Андрій Віталійович**  
**Роїк Олександр Сергійович**

Пролонговано: на **2020/2021** н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

на **2021/2022** н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.


**КИЇВ – 2019**

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

Роїк Олександр Сергійович, доц., д.х.н., доц. 

ЗАТВЕРДЖЕНО

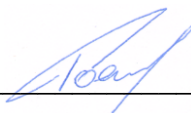
Зав. кафедри фізичної хімії

 (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** – ознайомити студентів з методами квантової хімії та нерівноважної термодинаміки, які використовуються при розрахунках фізичних властивостей системи, термодинаміки або кінетики хімічних реакцій. Формування теоретичного підґрунтя для розуміння сучасних квантово-хімічних методів моделювання та процесів самоорганізації в хімічних та біологічних системах.

## **2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни**

Студенти повинні знати вищу математику, фізику та основи квантової та фізичної хімії.

## **3. Анотація навчальної дисципліни**

Розглядаються теоретичні засади базових сучасних методів квантово-хімічних розрахунків та теоретичні основи нерівноважної термодинаміки. Студенти знайомляться з методологічною основою сучасних програмних пакетів, які використовуються для квантово-хімічного моделювання хімічних систем. та аналізу стійкості складних хімічних процесів. Розглядається роль процесів самоорганізації в автоколивальних хімічних процесах, хімії матеріалів та біологічних системах.

## **4. Завдання (навчальні цілі):**

- надати необхідний теоретичний базис для розуміння процесів самоорганізації при нерівноважних умовах
- підготувати студентів до роботи з пакетами програм, що використовуються для квантово-хімічних розрахунків та оцінки стійкості складних хімічних процесів;
- навчити студентів інтерпретувати дані, що наводяться в дослідженнях, де застосовувалися квантово-хімічні розрахунки та методи нерівноважної термодинаміки.

## **5. Результати навчання за дисципліною:**

<b>Код</b>	<b>Результат навчання</b>	<b>Форми викладання і навчання</b>	<b>Методи оцінювання</b> поточний контроль самостійної роботи ПтК, підсумковий контроль ПсК	<b>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</b>
<b>1. Знання</b>				
<b>1.1</b>	Знання основних характеристик методу Хартрі-Фока та його обмеження	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	10
<b>1.2</b>	Знання основних принципів кореляційного методу конфігураційної взаємодії та багаточастинкової теорії збурень	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	10
<b>1.3</b>	Знання про теоретичні основи теорії функціонала густини.	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	10
<b>1.4</b>	Знати застосування теоретичних основ лінійної нерівноважної термодинаміки для опису фізико-хімічних процесів	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	10

1.5	Знати про теоретичні основи самоорганізації у хімічних процесах, хімії матеріалів та біологічних системах	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	10
<b>2. Вміння</b>				
2.1	Використовувати набуті знання та вміння для квантово-хімічних розрахунків за допомогою варіаційний принцип та метод невизначених множників Лагранжа	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	15
2.2	Застосовувати лінійний аналіз стійкості для аналізу автоколивальних хімічних процесів	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	15
<b>3. Комунікація</b>				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології для аналізу та інтерпретації інформації по квантово-хімічних розрахунках та процесах самоорганізації	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання у співпраці з іншими виконавцями	Самостійні	ПтК, ПсК	5
<b>4. Автономність та відповідальність</b>				
4.1	Вміти проаналізувати та інтерпретувати дані, що стосуються квантово-хімічних розрахунків та процесів самоорганізації хімічних систем	Самостійні	ПсК	5
4.2	Дотримуватися правил наукової етики та академічної доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації у галузі квантової хімії та нерівноважної термодинаміки	Самостійні	ПсК	5

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

ПРН	РНД (код)											
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	2.1	2.2	3.1	3.2	4.1	4.2	
<b>Знання та вміння</b> Знати сталі наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+	+	+	+					
Знати та розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми.	+	+	+	+	+	+	+					

ПРН	РНД (код)											
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	2.1	2.2	3.1	3.2	4.1	4.2	
Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення якісних та кількісних задач невідомої природи.						+	+					
Знати методи синтезу та аналізу хімічних сполук.					+	+	+					
Знати методи комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+	+		+	+	+					
Знати методологію та організації наукового дослідження.	+	+	+	+	+	+	+					
Знати іноземну мову на рівні B2						+	+	+		+		
Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.						+	+	+	+	+	+	+
Знати методологію процесів навчання й виховання, а також передові методи формування навичок організації самостійної роботи									+	+	+	+
Здійснювати систематизацію та критичний аналіз даних.						+	+	+	+			
Планувати, організовувати та здійснювати експериментальну роботу самостійно та автономно.						+	+	+	+	+	+	+
Проводити лабораторні процедури з використанням сучасних контрольних-вимірювальних приладів.									+	+	+	+
Виконувати обробку результатів досліджень з використанням спеціального програмного забезпечення.						+	+	+	+	+	+	+
Обирати адекватні поставленій задачі методи комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.						+	+	+	+	+	+	+
Використовувати інформаційно-комунікаційні технології для вирішення загальних професійних задач.						+	+	+	+	+	+	+
Представляти науковий та практичний матеріал в письмовій та усній формах.						+	+	+	+	+	+	+
Представляти результати досліджень англійською мовою						+	+	+	+	+	+	+
Перекладати фахову літературу та розуміти наукові тексти хоча б однією іноземною мовою	+	+	+	+	+			+	+	+	+	+
Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросовісність						+	+	+	+	+	+	+

ПРН	РНД (код)											
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	2.1	2.2	3.1	3.2	4.1	4.2	
Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу, складати звіт.						+	+	+	+	+	+	
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.	+	+	+	+	+			+	+	+	+	
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії для вирішення прикладних задач.						+	+	+	+			
Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.						+	+	+	+			
Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.						+	+					
<b>Комунікація</b> Володіти навичками публічної мови та ведення дискусії з колегами та цільовою аудиторією.						+	+	+	+	+	+	
Працювати в міждисциплінарній команді, мати навички міжособистісної взаємодії з урахуванням етичних норм.						+	+	+	+	+	+	
Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології для спілкування, обміну та інтерпретації даних.						+	+	+	+	+	+	
<b>Автономія та відповідальність</b> Оцінювати ризики у професійній діяльності та здійснювати запобіжні дії.										+	+	
Брати на себе відповідальність за виконання експериментів.						+	+			+	+	
Діяти соціально та громадянсько свідомо на основі етичних міркувань.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Уміти вчитись самостійно для безперервного професійного розвитку.						+	+	+	+	+	+	
Приймати обґрунтовані рішення, нести відповідальність за власні судження та результати.						+	+	+	+	+	+	

## 7. Схема формування оцінки

### 7.1. Форми оцінювання студентів:

#### - семестрове оцінювання

- 1.1. активність під час лекції;
- 1.2. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.3. написання модульної контрольної роботи.

#### - підсумкове оцінювання

підсумкова контрольна робота  
залік за результатами роботи в семестрі

## 7.2. Організація оцінювання:

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Підсумкова контрольна робота	
	Min. – 24 балів	Max. – 40 балів	Min. – 24 балів	Max. – 40 балів	Min. – 12 балів	Max. – 20 балів
Доповнення	2	5	2	5		
Виконання домашньої самостійної роботи	12	20	12	20		
Модульна контрольна робота 1	10	15				
Модульна контрольна робота 2			10	15		
Підсумкова контрольна робота					12	20

Для студентів, які набрали впродовж семестру сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум для заліку (**60 балів**) допускається написання реферату за темами доповіді чи самостійної роботи, за які отримана незадовільна оцінка, або перескладання МКР, за які отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до доповіді / 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

За 100 – бальною шкалою	За національною шкалою
90 – 100	Зараховано
85 – 89	
75 – 84	
65 – 74	
60 – 64	
1 – 59	не зараховано

## 8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ лекції	Назва лекцій	Кількість годин	
		лекції	Самостійна робота
<b>ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ I " Методи квантової хімії "</b>			
1	Молекулярні орбіталі, енергія молекулярного іону водню, багатоелектронна функції, молекула водню.	2	4
2	Енергія багатоелектронної функції - детермінанта Слетера. Рівняння Хартрі-Фока.	2	4

3	Теорема Купманса. Рівняння Рутана.	3	5
4	Розширений метод Гюккеля. Заселеності за Малікеном. Варіаційний метод. Метод Рітца (прямий варіаційний метод). Метод конфігураційної взаємодії. (CI). Теорема Брилюена.	2	5
5	Проблема дисоціації молекули водню в RHF наближені та теорія конфігураційної взаємодії.	2	4
6	Стани $^1\Sigma_g^+$ і $^1\Sigma_g^-$ в молекулі водню. Різноманітні типи кореляції руху електронів. Енергія кореляційна.	2	4
7	Енергія кореляційна. Багаточастинкова теорія збурень. Мюлера-Пльосета метод.	2	4
8	Хоенберг-Кона теорема. Вираз для енергії через електронну густину. Рівняння Кона-Шама.	2	5
9	Вираз для енергії DFT. Приклади функціоналів, підхід до обрахунків.	3	5
<b>ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ II " Основи термодинаміки нерівноважних процесів"</b>			
10	Виробництво ентропії у нерівноважних процесах, функція дисипації. Концепція локальної рівноваги та межі її застосування в описі реальних (нерівноважних) процесів. Лінійна область нерівноважної термодинаміки. Лінійні феноменологічні закони.	2	4
11	Співвідношення взаємності Онзагера для кінетичних коефіцієнтів. Межі застосування теореми Онзагера. Вимоги симетрії при взаємодії потоків та сил (принцип Кюри-Пригожина).	2	4
12	Приклади застосування теорії Онзагера: дифузія, термодифузія (ефект Сорє), термоелектричні (ефекти Зеебека, Пальтьє), термомагнітні (ефекти Холла) та термомеханічні явища. Біологічні мембрани.	2	4
13	Критерії еволюції для рівноважних та нерівноважних станів (лінійна область). Теорема про мінімум виробництва ентропії для стаціонарного стану, межі її застосування. Застосування принципу мінімального виробництва ентропії у хімічній кінетиці.	2	4
14	Теорія флуктуацій. Класична теорія стійкості Гіббса для рівноважних систем, приклади її застосування. Стаціонарний стан термодинамічної системи та його стійкість поблизу рівноваги.	2	4
15	Стійкість стаціонарного стану у нелінійній області. Загальний критерій стійкості Ляпунова. Функції Ляпунова. Лінійний аналіз стійкості хімічних реакцій та приклади його застосування.	2	4
16	Загальний критерій еволюції. Розгляд кінетичних фазових переходів. Впорядкована поведінка термодинамічних систем в лінійній та нелінійній областях нерівноважних процесів.	2	4
17	Дисипативні структури та явища самоорганізації. Приклади просторової, часової та просторово-часової самоорганізації. Стійкість дисипативних структур.	2	4
18	Загальні положення теорії катастроф. Класифікація особливих точок. Атрактори та їх типи. Основні положення теорії біфуркацій. Якісні властивості дисипативних структур в околі точки біфуркації.	2	4
19	Прості автокаталітичні моделі хімічних реакцій: випадок двох проміжних продуктів, тримолекулярна модель (брюселятор). Біфуркація Хопфа. Вплив дифузії на стійкість брюселятора. Біфуркація Тюрінга.	2	4

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

Лекцій – **40 год.**

Самостійна робота - **80 год.**



## Рекомендована література.

### Змістовий модуль 1

#### Основна:

1. Слетер Дж. Электронная структура молекул. М. : Мир, 1965.
2. Л.Целюке. Квантовая химия. М. : Мир, 1976
3. Г.М.Жидомиров, А.А.Багатурьянц, И.А.Абронин Прикладная квантовая химия. Химия, 1979
4. И.В.Абаренков, В.Ф. Братцев, А.В. Тулуб Начала квантовой хими. Высшая школа, 1989.
5. F.Jensen. Introduction to computational chemistry. J.Wiley&Sons, 2001.
6. A.Szabo, N.Ostlund Modern quantum chemistry. Introduction to advanced electronic theory. Dover publ., 1989.
7. [classic.chem.msu.su](http://classic.chem.msu.su)
8. <https://avogadro.cc/>
9. <https://brettbode.github.io/wxmacmolplt/>
10. <https://orcaforum.cec.mpg.de/>

#### Додаткова:

11. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии, М.: Мир, 1972.
12. Яцимирський В.К., Яцимирський А.В. Квантова хімія. – К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2009.
13. Хохштрассер Р. Молекулярные аспекты симметрии. М.,: Мир, 1968.

### Змістовий модуль 2

#### Основна

1. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. – М.: Мир., 2002.
2. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. – М.: Мир., 1973.
3. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. – Ижевск: НИЦ, 2001.
4. Баблюянец А. Молекулы, динамика и жизнь. – М.: Мир., 1990.
5. Жаботинский А.М. Концентрационные колебания. – М.: Наука., 1974.
6. Николис Г., Пригожин И. Познание сложного. – М.: Мир., 1990.
7. Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса. – М.: Прогресс, 1986.

#### Додаткова

1. Базаров И.П. Термодинамика: Учеб. для вузов. – М.: Высшая школа., 1991.
2. Шелепин Л.А. Вдали от равновесия // Новое в жизни, науке, технике. Серия “Физика”. – 1987. – №8.
3. Волькенштейн М.В. Энтропия и информация. – М.: Наука., 1986.