

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича
Навчально-науковий інститут фізико - технічних та комп'ютерних наук
Кафедра термоелектрики та медичної фізики

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Директор навчально-наукового інституту
фізико-технічних та комп'ютерних наук


Олег АНГЕЛЬСЬКИЙ

09 ” серпня 2024 року

РОБОЧА ПРОГРАМА
навчальної дисципліни

Квантова хімія

(обов'язкова)

Освітньо-професійна програма Прикладна фізика та наноматеріали

Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Галузь знань 10 Природничі науки

Рівень вищої освіти Перший (бакалаврський)

Навчально-науковий інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук

Мова навчання Українська

Чернівці 2024 рік

Робоча програма навчальної дисципліни «**Квантова хімія**» складена відповідно до освітньо-професійної програми «Прикладна фізика та наноматеріали» підготовки здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали галузі знань 10 Природничі науки, затвердженої Вченою радою Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (Протокол № 6 від «26» травня 2022 року).

Розробник:

Маханець Олександр Михайлович, професор, доктор фізико-математичних наук, професор.

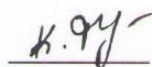
Викладач:

Маханець Олександр Михайлович, професор, доктор фізико-математичних наук, професор.

Погоджено з гарантом ОП і затверджено на засіданні кафедри термоелектрики та медичної фізики ННІФТКН ЧНУ імені Юрія Федьковича

Протокол № 1 від 09 серпня 2024 року

В.о. завідувача кафедри

 Кобилянський Р.Р.

Схвалено методичною радою ННІФТКН

Протокол № 1 від 09 серпня 2024 року

Голова методичної ради ННІФТКН

 Козярський І.П.

Пояснювальна записка

Мета навчальної дисципліни

В рамках курсу «Квантова хімія» теоретично, з точки зору квантової механіки, вивчаються молекули, які можуть складатися із десятків і сотень атомів, як система багатьох частинок, для якої необхідно знайти енергетичний стан її електронної підсистеми. Мета даної дисципліни полягає в тому, щоб бакалаври зі спеціальності "Прикладна фізика та наноматеріали" отримали певні професійні знання з квантової хімії. Вивчення предмету сформує у студентів систему практичних умінь з використанням основних методів квантової хімії, розвине у них уміння і навички проводити квантово-механічні розрахунки, що є фундаментом для подальшого вивчення квантових явищ при фізико-хімічних методах дослідження складу речовин. Знання, набуті під час вивчення курсу, є необхідними для подальшої професійної діяльності інженера з прикладної фізики.

Преквізити. Для успішного вивчення дисципліни «Квантова хімія» студенти повинні опанувати такі курси: Математичний аналіз, Аналітична геометрія та лінійна алгебра, Теорія ймовірності і математична статистика, Основи векторного і тензорного аналізу, Диференціальні та інтегральні рівняння, Механіка, Молекулярна фізика, Електрика і магнетизм, Фізика атома й атомних явищ, Оптика, Теоретична механіка й основи механіки суцільних середовищ, Квантова механіка.

Завдання вивчення навчальної дисципліни:

отримати знання про методи квантової хімії, ознайомитися і оволодіти сучасними методами розв'язку її задач, освоїти один із пакетів прикладних програм, провести розрахунки.

Результати навчання

Відповідно до освітньо-професійної програми «Прикладна фізика та наноматеріали», вивчення дисципліни «Квантова хімія» сприяє формуванню у здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти таких *компетентностей*:

Інтегральна компетентність:

ІК. Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми прикладної фізики та наноматеріалів, що передбачає застосування теорій та методів фізики, математики та інженерії й характеризується комплексністю та невизначеністю умов

Загальних:

ЗК1. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК2. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

Фахових:

ФК2. Здатність брати участь у плануванні і виконанні експериментів та лабораторних досліджень властивостей фізичних систем, фізичних явищ і процесів, обробленні й презентації їхніх результатів.

ФК6. Здатність використовувати сучасні теоретичні уявлення в галузі фізики для аналізу фізичних систем

Програмних результатів навчання:

РН1. Знати і розуміти сучасну фізику на рівні, достатньому для розв'язання складних спеціалізованих задач і практичних проблем прикладної фізики.

РН2. Застосовувати сучасні математичні методи для побудови й аналізу математичних моделей фізичних процесів.

РН3. Застосовувати ефективні технології, інструменти та методи експериментального дослідження властивостей речовин і матеріалів, включаючи наноматеріали, при розв'язанні практичних проблем прикладної фізики.

РН4. Застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, розробки приладів і наукоємних технологій.

РН12. Розуміти закономірності розвитку прикладної фізики, її місце в розвитку техніки, технологій і суспільства, у тому числі в розв'язанні екологічних проблем.

Отримані знання та навички дадуть змогу студентам аналізувати та моделювати поведінку різноманітних квантових систем багатьох частинок, розв'язувати задачі квантової хімії та застосовувати основні принципи квантової хімії у фізичних дослідженнях.

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен знати:

Основні поняття і концепції квантової механіки.

Три постулати Бора. Енергетичний спектр електрона в атомі водню (гідрогену).

Як відбувається квантування кутового моменту.

Рівняння Борна-Опенгеймера та Хартрі-Фока.

Енергетичну структуру молекулярного гідрогену.

Основні наближення і обчислювальні схеми методу молекулярних орбіталей.

уміти:

Скласти рівняння руху квантово-механічної системи та знаходити кінематичні характеристики руху.

Інтерпретувати квантово-механічні явища за допомогою теоретичного апарату.

Користуватися визначеннями квантово-механічних величин і понять.

Пояснювати характер поведінки квантово-механічних систем із застосуванням теорем квантової механіки та їх наслідків.

Проводити розрахунки електронного стану багатоелектронних атомів

Застосовувати основні методи дослідження рівноваги і руху квантово-механічних систем, а також теоретичні алгоритми дослідження при вирішенні конкретних фізичних задач на практиці.

Проводити розрахунки по оптимізації атомної структури молекули. Проводити розрахунки мод атомних коливань молекули, давати їм необхідну інтерпретацію, порівняти із відомими в сучасній літературі

Опис змісту робочої програми навчальної дисципліни Загальна інформація про розподіл годин

Назва навчальної дисципліни Квантова хімія												
Форма навчання	Курс	Семестр	Кількість			Кількість годин						Вид підсумкового контролю
			кредитів	годин	змістових модулів	лекції	практичні	семінарські	лабораторні	самостійна робота	індивідуальні завдання	
Денна	4	8	3	90	2	24	12			54		залік

Структура змісту навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	усього	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	с.р.
1	2	3	4	5	6	7
Змістовий модуль 1	Онови квантової механіки					
Тема 1. Основні постулати квантової механіки.	12	4	2			6
Тема 2. Модельні квантово-механічні задачі.	13	4	2			7
Тема 3 Квантування кутового моменту.	9	1	1			7
Разом за ЗМ 1	34	9	5			20
Змістовий модуль 2	Методи квантової хімії.					
Тема 4. Молекулярне рівняння Шредінгера.	12	3	2			7
Тема 5. Коливання молекул у гармонічному наближенні.	12	3	2			7
Тема 6. Молекулярний йон гідрогену.	11	3	1			7
Тема 7. Метод молекулярних орбіталей	11	3	1			7

Хюккеля.						
Тема 8. Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул.	10	3	1			6
Разом за ЗМ 2	56	15	7			34
Усього годин	90	24	12			54

Тематика лекційних занять з переліком питань

Тема 1. Основні постулати квантової механіки. Хвильова функція. Умови нормування. Густина ймовірності розподілу частинок у просторі, електронна густина. Оператори спостережуваних фізичних величин. Оператори координати, імпульсу, кутового моменту і його компонент, кінетичної та потенційної енергії. Оператор Гамільтона. Рівняння Шредінгера. Нестационарне рівняння Шредінгера. Стационарний стан і його властивості. Стационарне рівняння Шредінгера. Принцип суперпозиції. Ймовірність результатів вимірювання фізичних величин, їх середнє значення. Закони збереження у квантовій механіці.

Тема 2. Модельні квантово-механічні задачі. Вільний рух частинки, частинка в одновимірному потенційному ящику. Рівняння Шредінгера для частинки в потенційному ящику. Інтерпретація квантового числа. Частинка в тривимірному потенційному ящику, модуль вільного електрона для спряжених систем. Потенційні бар'єри і тунельний ефект. Приклади тунелювання. Гармонічний осцилятор.

Тема 3. Квантування кутового моменту. Рівні енергії у планетарній моделі атома. Стійкість системи в атомних масштабах згідно принципу невизначеності Гейзенберга. Принцип відповідності. Кутовий момент в моделі атома водню за Бором. Три постулати Бора. Приведена маса. Зв'язок між енергією та моментом обертання. Квантування моменту обертання.

Змістовий модуль 2. Методи квантової хімії.

Тема 4. Молекулярне рівняння Шредінгера. Адіабатичне наближення. Поверхня потенційної енергії. Електронна будова молекулярних систем. Стационарне рівняння Шредінгера для ізольованої молекули. Розв'язок рівняння Шредінгера. Наближення Борна-Оппенгеймера (адіабатичне наближення). Потенціальні криві та поверхні потенційної енергії. Їх загальна структура. Принцип тотожності частинок у квантовій механіці. Класифікація атомних орбіталей та атомні терми. Теорія молекули гелію.

Тема 5. Коливання молекул у гармонічному наближенні. Обертальний стан молекул. Типи молекулярних вібратів. Коливальний стан молекул. Квантово-механічний розв'язок рівняння Шредінгера при коливанні молекул. Правило відбору. Потенціал Морзе. Коливально-обертальні спектри. Комбінаційне розсіювання спектру. Специфічні правила відбору для спектрів комбінаційного розсіювання. Коливання валентні, коливання деформаційні, вироджені, симетричні валентні, антисиметричні валентні. Характеристичні коливання.

Тема 6. Молекулярний йон гідрогену. Утворення молекулярного іона водню. Тип зв'язку в молекулярному іоні водню. Розрахунок залежності повної енергії та її компонент. Склад молекулярного іона водню. Допущення Борна-Оппенгеймера і оператор Гамільтона для повної енергії системи. Будова хвильової функції для електронів за методом МО ЛКАО. Інтеграл перекриття. Резонансний інтеграл, обмінний інтеграл, кулонівський інтеграл. Потенційні криві молекули H_2^+ . Енергетична діаграма іону водню. Одиниці енергії та довжини.

Тема 7. Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Основні наближення і обчислювальна схема методу молекулярних орбіталей Хюккеля. π -електронне наближення. Кулонівський і резонансний інтеграл. Нехтування інтегралом перекриття. Рівняння для знаходження орбітальних коефіцієнтів. Хюккелівський детермінант. Енергетичні діаграми. Приклади хюккелівських розрахунків. Молекулярні діаграми для спряжених систем. Електронна структура вуглеводнів. Теорія реакційної здатності органічних сполук.

Тема 8. Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул. Резонансні структури. Правила побудови резонансних структур. Інтерпретація хімічного зв'язку в рамках методу валентних схем. Порівняння методів молекулярних орбіталей та валентних схем. Концепція резонансу. Резонансні (канонічні структури). Енергія резонансу. Кількісні характеристики

молекул. Заряди на атомах, порядки зв'язків, індекси вільної валентності та дипольні моменти. Розрахунок енергії зв'язку в молекулі водню.

Тематика практичних занять з переліком питань

№	Назва теми (завдання)
1.	Фізичні основи квантової теорії.
2.	Корпускулярно-хвильовий дуалізм. Теорія атома Бора.
3.	Задача на власні значення. Матричне подання лінійного оператора.
4.	Рівняння Шредінгера. Вимірювання у квантовій механіці.
5.	Задача про воднеподібний атом. Атомні орбіталі. Квантові числа та спостережувані фізичні величини.
6.	Частинка в одновимірному потенційному ящику. Частинка в тривимірному потенційному ящику.
7.	Варіаційний метод.
8.	Теорія збурень.
9.	Хвильова функція багатоелектронної системи. Метод самоузгодженого поля Атомні терми. Багатоелектронні атоми і Періодична система елементів.
10.	Метод молекулярних орбіталей Молекулярний іон водню. Метод МО ЛКАО для двохатомних молекул. Метод МО для багатоатомних молекул.
11.	Напівемпіричні методи.
12.	Неемпіричні методи.

Завдання для самостійної роботи студентів

№	Назва теми
1.	Принципи квантової механіки як основи квантової хімії. Становлення квантової хімії. Роль обчислювальної техніки в розвитку квантової хімії.
2.	Модель вільного електрона для π -систем.
3.	Квантовий осцилятор. Особливості енергетичного спектра і хвильових функцій осцилятора. Коливання двохатомної молекули.
4.	Бозони і ферміони.
5.	Елементи теорії груп. Точкові групи симетрії молекул (позначення Шенфліса, класифікація).

Контроль виконання завдань, винесених на самостійне опрацювання проводиться в рамках модульного контролю. Бали за цю роботу входять у загальну кількість балів за конкретний модуль.

Методи навчання

Методи навчання:

лекції: проблемний виклад, частково-пошукові та дослідницькі методи, презентації, бесіди і дискусії;

практичні заняття: репродуктивний метод, дослідницький метод;

лабораторні заняття: метод проблемного підходу, дослідницький метод.

Самостійна робота студентів передбачає: конспектування лекційного матеріалу; вивчення теоретичного матеріалу лекційних занять та опрацювання літературних джерел, рекомендованих цією програмою; проведення розрахунків та підготовку звітів з практичних та лабораторних робіт.

Інтерактивні методи навчання: застосуванням електронних мультимедійних комплексів навчальних дисциплін та ресурсів, а також платформи для дистанційного навчання Moodle (<https://moodle.chnu.edu.ua>).

Форми навчальних занять: лекції, лабораторні заняття, практичні заняття, консультації.

Система контролю та оцінювання

Методи контролю

У процесі оцінювання навчальних досягнень застосовуються методи усного і письмового контролю, зокрема такі **засоби оцінювання** та демонстрування результатів навчання:

- *засоби усного контролю:* індивідуальне опитування, фронтальне опитування, презентації

результатів виконаних завдань;

- *засоби письмового контролю*: контрольні роботи, тестування, самостійні роботи, виконання та захист лабораторних;
- *засоби самоконтролю*: уміння самостійно оцінювати свої знання, самоаналіз.

У разі проведення навчального процесу та оцінювання у дистанційній формі використовуються засоби Moodle (у тому числі тестування; <https://moodle.chnu.edu.ua> <https://www.classtime.com/>).

Система оцінювання знань є накопичувальною (складається із суми балів за різними видами здійсненого контролю).

Форми контролю

Основними формами поточного контролю є:

- усні відповіді студентів;
- виконання тестових завдань з метою перевірки рівня засвоєння теоретичного матеріалу за навчальними темами;
- усна відповідь студента при здачі лабораторної роботи;
- виконання модульної контрольної роботи (тестування та розв'язання навчально-професійних задач).

Зазначені форми контролю на лекційних, практичних та лабораторних заняттях є обов'язковими для всіх студентів.

Форма підсумкового контролю – залік.

Критерії оцінювання поточного та підсумкового контролю навчальних досягнень

Критерії оцінювання навчальних досягнень студентів за результатами поточного контролю

Критеріями оцінювання навчальних досягнень студентів за результатами поточного контролю є:

- Знання теоретичного матеріалу
- Практичні навички
- Самостійність і критичне мислення
- Якість виконання завдань
- Активність на заняттях
- Дотримання термінів виконання завдань
- Академічна доброчесність

Розподіл балів, які отримують студенти за модулі

Поточне оцінювання (аудиторна, самостійна робота та модульний контроль)		Кількість балів (екзамен)	Сумарна к-ть балів
Змістовий модуль №1	Змістовий модуль №2		
T1, T2, T3	T4, T5, T6, T7, T8		
30	30	40	100

T1, T2, T3, T4, T5, T6, T7, T8 – теми змістових модулів.

Критерії підсумкового оцінювання результатів навчання студентів з навчальної дисципліни

Критерієм підсумкового оцінювання є досягнення студентом певних знань передбаченим результатом навчання, коли студент опанував теоретичними та практичними знаннями навчальної дисципліни.

На залік виносяться питання теоретичних знань і практичних навиків студентів з навчальної дисципліни. Білети на залік містять два теоретичних питання і одну практичну задачу.

Теоретичні питання (пункт 1 і 2 білетів) оцінюються максимальною кількістю балів рівною 15 за наступними критеріями:

- ◆ **13-15 балів**: коли студентом дані правильні вичерпні відповіді на всі поставлені запитання.

- ◆ **9-12 балів:** коли студентом дані правильні відповіді на всі поставлені запитання, але відповіді не зовсім повні, в окремих випадках допущені незначні неточності у формулюванні, окремі моменти не дістали належного з'ясування.
- ◆ **6-8 балів:** коли відповідь студента правильна і становить більше половини матеріалу, що містять питання згідно програми, але присутні істотні помилки.
- ◆ **0-5 балів:** коли не дано правильні відповіді на поставлені запитання, або відповіді надто поверхові, непослідовні і неточні.

Практичне завдання (пункт 3 білетів) оцінюються максимальною кількістю балів рівною 10 за наступними критеріями:

- ◆ **10 балів** – Завдання виконано повністю правильно, обґрунтовано, оформлено логічно й структуровано.
- ◆ **8-9 балів** – Загалом правильно, але є незначні неточності.
- ◆ **6-7 балів** – Основна ідея правильна, але є кілька помітних помилок.
- ◆ **4-5 балів** – Присутня спроба виконання завдання, але є серйозні.
- ◆ **2-3 бали** – Невірний підхід або значні помилки при виконанні завдання.
- ◆ **1 бал** – Слабка спроба виконання завдання без логічного пояснення.
- ◆ **0 балів** – Завдання не виконане і спроб виконання не було.

Шкала оцінювання: національна та ЄКТС

Рейтингова оцінка з дисципліни	Оцінка за шкалою ЄКТС	Екзаменаційна оцінка за національною шкалою	Залік за національною шкалою
90-100	A	5 (відмінно)	Зараховано
80-89	B	4 (добре)	
70-79	C	4 (добре)	
60-69	D	3 (задовільно)	
50-59	E	3 (задовільно)	
35-49	Fx	2 (незадовільно) з можливістю повторного складання	Не зараховано
1-34	F	2 (незадовільно) з повторним опрацюванням освітнього компонента	

Критерії підсумкової оцінки як показника результатів вивчення навчальної дисципліни

Згідно шкали ЄКТС загальна кількість балів, яку студент може отримати у процесі вивчення дисципліни, становить 100 балів, з яких 60 балів студент набирає при поточних видах контролю і 40 балів – у процесі підсумкового контролю (залік).

Таким чином знання студентів оцінюється як з теоретичної, так і з практичної підготовки за такими критеріями:

«A» 90-100 балів ставиться у разі, якщо студент:	– постійно готувався до занять згідно з програмою дисципліни; – глибоко та всебічно розкривав зміст питань; – показав уміння формулювати висновки, узагальнювати та аналізувати навчальний матеріал; – показав уміння вільно виконувати завдання; – переконливо та логічно викладав матеріал, проявляв творчий підхід до виконання практичних завдань та підготовки до лабораторних робіт; – належним чином виконував завдання для самостійної роботи; – виконав завдання модульного контролю або допускав при усних відповідях та тестуванні окремі незначні неточності.
«B»	– розкривав згідно з програмою дисципліни зміст питань;

80-89 балів ставиться у разі, якщо студент:	– робив узагальнення та висновки з окремих питань; – виконав усі лабораторні роботи; – виконував завдання для самостійної роботи; – виконав завдання модульного контролю, але недостатньо використовував додаткову літературу; – при усних відповідях не досить повно і аргументовано викладав матеріал, а при тестуванні мали місце окремі неточності; – не проявив творчий підхід до виконання індивідуальних завдань та наукових повідомлень.
«C» 70-79 балів ставиться у разі, якщо студент:	– розкривав згідно з програмою дисципліни зміст питань; – формулював висновки з окремих питань практичних занять; – брав участь у виконанні практичних завдань; – виконував завдання для самостійної роботи; – виконав завдання модульного контролю, але допускав окремі неточності при усних відповідях, тестуванні; – не проявляв належної активності на лекційних та лабораторних заняттях, недостатньо використовував додаткову літературу; неохайно виконував завдання лабораторних робіт.
«D» 60-69 ставиться у разі, якщо студент:	– відповідав на окремі питання, які обговорювалися; – формулював висновки з окремих питань; – виконував завдання для самостійної роботи; – виконав завдання модульного контролю, але допускав окремі неточності; – не проявляв належної активності на лабораторних заняттях та старанності при виконанні завдань для самостійної роботи; – недостатньо використовував додаткову літературу, не належним чином виконав практичні завдання; – виконав не всі завдання для самостійної роботи
«E» 50-59 балів ставиться у разі, якщо студент:	– відповідав на окремі питання, які обговорювалися; – виконував окремі завдання для самостійної роботи; – виконав завдання модульного контролю, але допускав неточності при усних відповідях (будуючи свою відповідь на звичайному повторенні навчального матеріалу без його осмислення), тестуванні; – не проявляв належної активності на практичних заняттях, старанності при виконанні завдань для самостійної роботи; – недостатньо використовував основну та додаткову літературу; – не належним чином виконував індивідуальні завдання.
«Fx» 35-49 балів ставиться у разі, якщо студент:	– поверхнево розкривав зміст питань, які розглядалися; – допускав суттєві помилки при усних та письмових відповідях; – поверхнево ознайомився з рекомендованою літературою; – частково виконав завдання для самостійної роботи; – не проявляв активності на практичних заняттях; – допускав принципові помилки під час виконання завдань; – не виконав завдання модульного контролю.
«F» 1-34 балів ставиться у разі, якщо студент:	– поверхнево розкривав зміст питань, які розглядалися; – допускав суттєві помилки при усних та письмових відповідях; – поверхнево ознайомився з рекомендованою літературою; – не виконав завдання для самостійної роботи; – не виконав практичне завдання; – на підсумковому занятті не вміє відтворити зміст окремих питань, передбачених програмою дисципліни; – не виконав завдання модульного контролю.

Питання для поточного контролю

Змістовний модуль 1-2.

1. Хвильова функція. Умови нормування.
2. Оператори координати, імпульсу, кутового моменту і його компонент, кінетичної та потенційної енергії.
3. Оператор Гамільтона. Рівняння Шредінгера.
4. Стаціонарне рівняння Шредінгера.
5. Принцип суперпозиції. Імовірність результатів вимірювання фізичних величин, їх середнє значення.
6. Вільний рух частинки.
7. Частинка в одновимірному потенційному ящику.
8. Частинка в тривимірному потенційному ящику.
9. Потенційні бар'єри і тунельний ефект.
10. Гармонічний осцилятор.
11. Квантування моменту обертання.
12. Три постулати Бора.
13. Адіабатичне наближення.
14. Стаціонарне рівняння Шредінгера для ізольованої молекули. Розв'язок рівняння Шредінгера.
15. Принцип тотожності частинок у квантовій механіці.
16. Класифікація атомних орбіталей та атомні терми.
17. Теорія молекули гелію.
18. Обертальний коливальний стан молекул.
19. Потенціал Морзе.
20. Комбінаційне розсіювання спектру.
21. Характеристичні коливання.
22. Утворення молекулярного іона водню. Тип зв'язку в молекулярному іоні водню.
23. Допущення Борна-Оппенгеймера і оператор Гамільтона для повної енергії системи.
24. Будова хвильової функції для електронів за методом МО ЛКАО.
25. Енергетична діаграма іону водню.
26. Основні наближення і обчислювальна схема методу молекулярних орбіталей Хюккеля.
27. Хюккелівський детермінант. Енергетичні діаграми.
28. Електронна структура вуглеводнів.
29. Теорія реакційної здатності органічних сполук.
30. Резонансні структури. Правила побудови резонансних структур.
31. Порівняння методів молекулярних орбіталей та валентних схем.
32. Резонансні (канонічні) структури. Енергія резонансу.
33. Кількісні характеристики молекул.
34. Заряди на атомах, порядки зв'язків, індекси вільної валентності та дипольні моменти.
35. Розрахунок енергії зв'язку в молекулі водню.

Питання для підсумкового контролю

36. Хвильова функція. Умови нормування.
37. Оператори координати, імпульсу, кутового моменту і його компонент, кінетичної та потенційної енергії.
38. Оператор Гамільтона. Рівняння Шредінгера.
39. Стаціонарне рівняння Шредінгера.
40. Принцип суперпозиції. Імовірність результатів вимірювання фізичних величин, їх середнє значення.
41. Вільний рух частинки.
42. Частинка в одновимірному потенційному ящику.
43. Частинка в тривимірному потенційному ящику.
44. Потенційні бар'єри і тунельний ефект.
45. Гармонічний осцилятор.
46. Квантування моменту обертання.
47. Три постулати Бора.

48. Адіабатичне наближення.
49. Стаціонарне рівняння Шредінгера для ізольованої молекули. Розв'язок рівняння Шредінгера.
50. Принцип тотожності частинок у квантовій механіці.
51. Класифікація атомних орбіталей та атомні терми.
52. Теорія молекули гелію.
53. Обертальний коливальний стан молекул.
54. Потенціал Морзе.
55. Комбінаційне розсіювання спектру.
56. Характеристичні коливання.
57. Утворення молекулярного іона водню. Тип зв'язку в молекулярному іоні водню.
58. Допущення Борна-Оппенгеймера і оператор Гамільтона для повної енергії системи.
59. Будова хвильової функції для електронів за методом МО ЛКАО.
60. Енергетична діаграма іону водню.
61. Основні наближення і обчислювальна схема методу молекулярних орбіталей Хюккеля.
62. Хюккелівський детермінант. Енергетичні діаграми.
63. Електронна структура вуглеводнів.
64. Теорія реакційної здатності органічних сполук.
65. Резонансні структури. Правила побудови резонансних структур.
66. Порівняння методів молекулярних орбіталей та валентних схем.
67. Резонансні (канонічні) структури. Енергія резонансу.
68. Кількісні характеристики молекул.
69. Заряди на атомах, порядки зв'язків, індекси вільної валентності та дипольні моменти.
70. Розрахунок енергії зв'язку в молекулі водню.

Зарахування результатів неформальної освіти

Відповідно до «Положення про взаємодію формальної та неформальної освіти, визнання результатів навчання (здобутих шляхом неформальної та/або інформальної освіти, в системі формальної освіти) у Чернівецькому національному університеті імені Юрія Федьковича (протокол № 109 від 28 березня 2022 року) (<https://www.chnu.edu.ua/media/3aykf41y/polozhennia-pro-vzaemodiiu-formalnoi-ta-neformalnoi-osvity.pdf>) у процесі вивчення дисципліни здобувачу освіти може бути зараховано до 25% балів, отриманих за результатами неформальної та/ або інформальної освіти з проблем, що відповідають тематиці курсу.

Рекомендована література

Основна література

1. Yong D. C. Computational Chemistry, Wiley Interscience. New York, 2001. 370 p.
2. Вакарчук І.О. Квантова механіка / Іван Олександрович Вакарчук - Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2004. - 784 с.
3. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія - Харків: Гімназія, 2008. - 443 с.
4. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підр. Для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «Києво-Могилянська академія», 2009. -458 с.
5. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підр. Для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «Києво-Могилянська академія», 2009. -458 с.

Допоміжна література

1. Федорченко А.М. Теоретична фізика: в 2 т. Т. 2. Квантова механіка, термодинаміка і статистична фізика. – К.: Вища шк., 1993.
2. Юхновський І.Р. Основи квантової механіки / Іван Романович Юхновський - К.:с.Либідь, 2002. - 390 с.
3. Курта С.А. Будова речовини: Навчально-методичний посібник. – Івано-Франківськ: ВДВ ЦІТ Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника, 2007. - 162 с.

Інформаційні ресурси

1. <http://www.irbis-nbuv.gov.ua/>: Національна бібліотека України ім. В.І. Вернадського.
2. <http://www.ilkharkov.ua/bvi/oqurtsov/oqurtsov.htm>: Підручники, Харків.

3.[https://books.google](https://books.google.com.ua/books/about/Modern_Quantum_Chemistry.html?id=KQ3DAgAAQBAJ&redir_esc=y)

.com.ua/books/about/Modern_Quantum_Chemistry.html?id=KQ3DAgAAQBAJ&redir_esc=y

4.https://books.google.com.ua/books/about/Quantum_chemistry_and_spectroscopy.html?id=BGcvAQAAIAAJ&redir_esc=y

5. <https://www.goodreads.com/book/show/45135807-ideas-of-quantum-chemistry>

Політика щодо академічної доброчесності

Дотримання політики щодо академічної доброчесності учасниками освітнього процесу при вивченні навчальної дисципліни регламентовано такими документами:

- «Етичний кодекс Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича»

<https://www.chnu.edu.ua/media/jxdfs0zb/etychnyi-kodeks-chernivetskoho-natsionalnoho-universytetu.pdf>

- «Положення про виявлення та запобігання академічного плагіату у Чернівецькому національному університеті імені Юрія Федьковича»

https://www.chnu.edu.ua/media/f5eleobm/polozhennya-pro-zapobihannia-plahiatu_2024.pdf

Дотримання академічної доброчесності передбачає:

- самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання (для осіб з особливими освітніми потребами ця вимога застосовується з урахуванням їхніх індивідуальних потреб і можливостей);

- посилення на джерела інформації у разі використання не авторських ідей, розробок, тверджень, відомостей і т.п.;

- дотримання норм законодавства про авторське право і суміжні права;

- надання достовірної інформації про результати власної наукової діяльності, використані методики досліджень і джерела інформації.

Порушенням академічної доброчесності вважається:

- академічний плагіат – оприлюднення (частково або повністю) наукових (творчих) результатів, отриманих іншими особами, як результатів власного дослідження (творчості) та/або відтворення опублікованих текстів (оприлюднених творів мистецтва) інших авторів без зазначення авторства;

- фабрикація – вигадкування даних чи фактів, що використовуються в наукових дослідженнях;

- фальсифікація – свідомо зміна чи модифікація вже наявних даних, що стосуються наукових досліджень.

За порушення академічної доброчесності здобувачі освіти можуть бути притягнені до такої академічної відповідальності:

- повторне проходження оцінювання (модульний контроль, іспит, залік тощо);

- повторне проходження відповідного освітнього компонента освітньої програми.