

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
КАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА»**

**Факультет природничих наук**

**Кафедра хімії**



**СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**ОСНОВИ КВАНТОВОЇ ХІМІЇ**

Рівень вищої освіти - перший

Освітня програма Хімія

Спеціальність ЕЗ Хімія

Галузь знань Е Природничі науки, математика та статистика.

Затверджено на засіданні кафедри  
Протокол № 8 від “26” серпня 2025 р.

м. Івано-Франківськ  
- 2025

## ЗМІСТ

1. Загальна інформація
2. Анотація до курсу
3. Мета та цілі курсу
4. Компетентності
5. Результати навчання
6. Організація навчання курсу
7. Система оцінювання курсу
8. Політика курсу
9. Рекомендована література

<b>1. Загальна інформація</b>	
<b>Назва дисципліни</b>	<b>Основи квантової хімії</b>
<b>Освітньо-профес. програма</b>	Хімія
<b>Спеціалізація</b>	– Хімія
<b>Спеціальність</b>	Е 3 «Хімія»
<b>Галузь знань</b>	Галузь знань Е Природничі науки, математика та статистика.
<b>Освітній рівень</b>	Бакалавр
<b>Статус дисципліни</b>	Основна
<b>Посилання на сайт дист. навчання</b>	<a href="http://www.d-learn.pu.if.ua/">http://www.d-learn.pu.if.ua/</a>
<b>Мова викладання</b>	Українська
<b>E-mail викладача</b>	<a href="mailto:sergiykurta@pnu.edu.ua">sergiykurta@pnu.edu.ua</a> , <a href="mailto:serhii.kurta@cnu.edu.ua">serhii.kurta@cnu.edu.ua</a>
<b>Лекції</b>	18 год
<b>Практичні заняття</b>	12 год
<b>Консультації</b>	щотижня
<b>2. Анотація до курсу</b>	
<p>Дисципліна «Основи квантової хімії» належить до переліку нормативних навчальних дисциплін за освітнім рівнем «бакалавр», що пропонується для професійної підготовки студентів за освітньою програмою 102 «Хімія» на другому році навчання. Вона забезпечує формування у студентів загальних і фахових компетентностей, спрямована на засвоєння теоретичних знань та практичних навичок, щодо сучасного розуміння будови речовин.</p>	
<b>3. Мета та цілі курсу</b>	
<p>Сучасні уявлення про будову атомів, молекул та речовин ґрунтуються на квантовій теорії, основна ідея якої полягає в корпускулярно-хвильовому дуалізмі матерії. Відповідно до такої ідеї матерія може проявляти властивості як частинок (корпускул), так і хвиль. Дисципліна «Основи квантової хімії» подана як безперервний шлях від класичної механіки, що описує рух частинок, до сучасних квантово-хімічних методів розрахунку властивостей молекул.</p> <p><b>Мета</b> навчальної дисципліни «Основи квантової хімії» забезпечити можливість ознайомлення з основами квантової механіки, диференціальними рівняннями, операторами, рівнянням Шредінгера, його розв'язками, квантово-хімічними підходами до опису будови і властивостей атомів та молекул. Дисципліна покликана сформулювати уявлення про сучасні теоретичні методи, якими вивчають будову простих та складних речовин, зокрема електронну будову атомів, молекул, йонів, вільних радикалів, а також сформулювати вміння розраховувати електронну будову атомно-молекулярних систем з використанням сучасних квантово-хімічних розрахунків та інформаційних технологій.</p> <p>У результаті вивчення даного курсу студент повинен</p> <p><b>знати:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- основні закони будови речовини,</li> <li>- закони (постулати) квантової механіки,</li> <li>- моделі атома,</li> <li>- постулати Бора, спектр атома водню за Бором,</li> <li>- суть корпускулярно-хвильового дуалізму речовини,</li> <li>- основні властивості хвиль де Бройля,</li> <li>- співвідношення невизначеностей та їх математичну інтерпретацію,</li> <li>- поняття про хвильову функцію та її властивості,</li> <li>- рівняння Шредінгера для стаціонарних станів,</li> <li>- принцип Паулі, поняття про спин електрона;</li> <li>- чотири квантові числа та їх суть;</li> <li>- електронну будову атомів та інтерпретацію властивостей елементів періодичної системи;</li> <li>- квантово-механічне пояснення основних типів хімічного зв'язку;</li> </ul> <p><b>вміти:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- застосовувати теоретичні основи квантової хімії у навчальному процесі,</li> <li>- робити теоретичні узагальнення про властивості атомів за їх електронною будовою;</li> <li>- застосувати отримані теоретичні знання для вирішення прикладних завдань аналітичного характеру;</li> </ul>	

- проводити опис і розрахунки електронної будови молекул та інтерпретувати результати розрахунків з хімічної точки зору;
- використати набуті знання при вивченні інших дисциплін, в лабораторній практиці, в науково-дослідницькій роботі або в інших сферах діяльності;
- самостійно працювати з додатковими інформаційними та літературними джерелами.

#### 4. Результати навчання (компетентності)

##### Загальні компетентності (ЗК)

ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК 5. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК 10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК-14 Здатності працювати в міждисциплінарній команді та/або зберігати та примножувати моральні, культурні, наукові цінності, вміння працювати в команді різного профілю.

##### Спеціальні (фахові) компетентності (СК)

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

СК 5. Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.

СК 10. Здатність до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання.

СК 11. Здатність формулювати етичні та соціальні проблеми, які стоять перед хімією, та здатність застосовувати етичні стандарти досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (наукова доброчесність).

##### Очікувані програмні результати навчання (ПРН)

ПРН5. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.

ПРН6. Розуміти періодичний закон та періодичну систему елементів, описувати, пояснювати та передбачати властивості хімічних елементів та сполук на їх основі.

ПРН7. Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.

ПРН13. Аналізувати та оцінювати дані, синтезувати нові ідеї, що стосуються хімії та її прикладних застосувань.

ПРН20. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.

ПРН24. Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.

#### 5. Організація навчання курсу

##### Обсяг курсу

Вид заняття	Загальна кількість годин
Лекції	18
Практичні заняття	12
Самостійна робота	60

##### Ознаки курсу

Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний / вибірковий
III	102 Хімія	II	нормативна

##### Тематика курсу

Тема, план	Форма заняття	Література	Завдання, год.	Вага оцінки	Термін виконання
------------	------------------	------------	----------------	-------------	---------------------

##### Вступ. Елементи теорії будови речовини

<b>Тема 1.</b> Елементарні частинки та основні взаємодії у Всесвіті.	Лекція (1 год.)	[1, 2]	Підготовка рефератів, презентацій 2 год.	5	Згідно розкладу
--	--------------------	--------	---	---	-----------------

<b>Тема 2.</b> Будова атомних ядер та їх загальна характеристика. Виникнення і поширеність хімічних елементів у Всесвіті.	Самостій-на робота	[1, 2]	Підготовка доповідей, презентацій 3 год.	5	Згідно розкладу
<b>Тема 3.</b> Класична електростатична теорія будови малих молекул.	Практичне заняття	[1, 6]	Тестові завдання, 5 год.	5	Згідно розкладу
<b>Змістовий модуль 1.</b> <b>Методи розв'язку рівняння Шредінгера для атомів і молекул.</b>					
<b>Тема 4.</b> Основні постулати квантової механіки. Математичний апарат квантової механіки. Оператори фізичних величин та їх властивості. Рівняння Шредінгера.	Лекція (1 год.)/ Практичне заняття	[1-3]	Опрацювання питань лекції. Тестові завдання 5 год.	5	Згідно розкладу
<b>Тема 5.</b> Модельні квантово-механічні задачі. Мікрочастинка в потенціальній прямокутній ямі. Рух мікрочастинки в області потенціального порогового бар'єру.	Лекція (1 год.)	[1, 2, 3]	Опрацювання питань лекції. Підготовка доповідей, презентацій 5 год.	5	Згідно розкладу
<b>Тема 6.</b> Будова атома. Розв'язок рівняння Шредінгера для гідрогенподібного атома. Типи симетрії атомних орбіталей. Енергія і розподіл електронної густини в гідрогенподібному атомі. Збуджені стани гідрогенподібного атома.	Лекція (2 год.)	[1-3]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 5 год.	5	Згідно розкладу
<b>Тема 7.</b> Атом Гідрогену. Атомні орбіталі. Магнітні властивості електронів у атомі. Поняття про спін електрона.	Лекція (2 год.)	[1, 2, 4]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 5 год.	5	Згідно розкладу
<b>Тема 8.</b> Хвильова функція багатеелектронної системи. Атомні терми. Спін-орбітальна взаємодія.	Лекція (1 год.)/ Практичне заняття	[1-3, 6]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 10 год.	Контрольна робота 10	Згідно розкладу
<b>Змістовий модуль 2.</b> <b>Будова молекул та хімічний зв'язок.</b>					

<b>Тема 9.</b> Теорія хімічного зв'язку. Розв'язання рівняння Шредінгера для молекул. Метод Гейтлера і Лондона. Валентність елементів у теорії Гейтлера-Лондона. Напрявленість валентних зв'язків. Поняття про гібридизацію атомних орбіталей.	Лекція (2 год.)/ Практичне заняття	[1-4]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 5 год.	5	Згідно розкладу
<b>Тема 10.</b> Метод молекулярних орбіталей (ММО). Молекулярні орбіталі двохатомних молекул. Зв'язуючі властивості. Симетрія. Енергія. Молекулярні терми.	Лекція (2 год.)/ Практичне заняття	[1-4]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 5 год.	5	Згідно розкладу
<b>Тема 11.</b> Типи хімічних зв'язків. Полярність та насиченість хімічного зв'язку. Донорно-акцепторний зв'язок. Йонний зв'язок в двохатомних молекулах. Поняття про електронегативність елементів. Ненасиченість йонного зв'язку. Міжмолекулярні взаємодії. Водневий зв'язок.	Лекція (2 год.)/ Практичне заняття	[1-4]	Опрацювання питань лекції. Розв'язування задач 10 год.	Контрольна робота 10	Згідно розкладу
<b>Змістовий модуль 3</b>					
<b>Характеристика основних квантово-хімічних наближень.</b>					
<b>Тема 10.</b> Квантово-хімічні розрахунки будови молекул. Наближення Борна-Оппенгеймера. Хвильова функція багатоелектронної системи.	Лекція (1 год.)	[1-6]	Підготовка доповідей, презентацій, 5 год.	5	Згідно розкладу
<b>Тема 11.</b> Наближені методи розв'язку рівняння Шредінгера. Метод самоузгодженого поля. Рівняння Хартрі. Рівняння самоузгодженого поля	Лекція (1 год.)	[1-3, 6]	Опрацювання питань лекції. Підготовка доповідей, презентацій, 5 год.	5	Згідно розкладу

Хартрі-Фока. Рівняння Хартрі-Фока-Рутаана.					
<b>Тема 12.</b> Базисні набори атомних орбіталей. Базисні функції.	Лекція (1 год.)	[1-3, 6]	Піготовка рефератів, презентацій 5 год.	5	Згідно розкладу
<b>Тема 13.</b> Методи електронної кореляції. Введення різних орбіталей для електронів $\alpha$ і $\beta$ -підсистем. Метод повної конфігураційної взаємодії. Метод обмеженої конфігураційної взаємодії.	Лекція (1 год.)	[2, 3, 6]	Опрацювання питань лекції. Підготовка доповідей, презентацій, 5 год.	5	Згідно розкладу
<b>Тема 14.</b> Інші підходи для квантово-хімічних розрахунків будови молекул. Основи теорії функціоналу густини. Багаточастинкова теорія збурення.	Самостійна робота	[2, 3, 6]	Підготовка доповідей, презентацій, 5 год.	Підсумкове тестування 10	Згідно розкладу
<b>Підсумковий контроль (екзамен)</b>				<b>50</b>	
<b>6. Система оцінювання курсу</b>					
Загальна система оцінювання курсу	<p>Поточний контроль здійснюється під час лекцій та проведення практичних занять і має на меті перевірку знань студентів з окремих тем навчальної дисципліни та рівня їх підготовленості до виконання конкретної роботи. Оцінки у національній шкалі («відмінно» - 5, «добре» - 4, «задовільно» - 3, «незадовільно» - 2), отримані студентами, виставляються у журналах обліку відвідування та успішності академічної групи.</p> <p>Модульний контроль (сума балів за окремий змістовий модуль) виставляється на підставі оцінювання результатів знань студентів після вивчення матеріалу з логічно завершеної частини дисципліни – змістового модуля. Завданням модульного контролю є перевірка розуміння та засвоєння певного матеріалу (теми), вміння вирішувати конкретні ситуативні задачі, здатності осмислювати зміст даної частини дисципліни, уміння публічно чи письмово подати певний матеріал.</p> <p>Семестровий (підсумковий) контроль проводиться у формі екзамену з врахуванням оцінок отриманих за окремі модулі. <i>Екзамен</i> – форма підсумкового контролю, яка передбачає перевірку розуміння студентом теоретичного та практичного програмного матеріалу з усієї дисципліни, здатності творчо використовувати здобуті знання та вміння, формувати власне ставлення до певної проблеми.</p>				
Умови допуску до підсумкового контролю	Студент допускається до складання екзамену, якщо впродовж семестру він за змістові модулі набрав сумарно 25 балів і вище. Якщо впродовж семестру за змістові модулі студент набрав менше 25 балів - студенту				

	у відомості робиться запис «не допущений» і виставляється набрана кількість балів. Допускається, як виняток, з дозволу декана факультету за заявою, погодженою з кафедрою, одноразове виконання студентом додаткових видів робіт з навчальної дисципліни (відпрацювання пропущених занять, перекладання змістових модулів, виконання індивідуальних завдань тощо) для підвищення оцінок за змістові модулі.
--	---

#### 7. Політика курсу

Для кращого засвоєння навчальної дисципліни на заняттях рекомендується використовувати сучасні навчально-контролюючі комп'ютерні технології, навчальний і контролюючий дидактичний матеріал. Посилення практичної спрямованості навчального процесу вимагає підвищення уваги до формування експериментально-практичних умінь і навичок.

Протягом семестру для перевірки знань студентів та контролю за самостійною роботою студента застосовують домашні контрольні роботи, письмові роботи, підготовка доповідей і презентацій.

На початку викладання курсу перед студентом виставляється система вимог та правил поведінки і відвідування практичних занять, доводяться до відома методичні рекомендації щодо виконання контрольних робіт, тестових завдань. Все це гарантує високу ефективність навчального процесу і є обов'язковим для успішного засвоєння програмового матеріалу даного курсу.

#### 8. Рекомендована література

##### Базова

1. Основи квантової хімії (Навчально-методичний посібник) / [Електронний ресурс] / Курта С.А., Хацевич О.М. / Факультет природничих наук; ДВНЗ "Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника". - Івано-Франківськ, 2018. 235 с.
2. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. - 4-те вид., доп.- Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. 872 с.
3. Springborg M., Zhou M. Quantum Chemistry. De Gruyter, 2021. <https://doi.org/10.1515/9783110742206>
4. Квантова хімія. Дослідження протонування органічних сполук [Електронний ресурс] : електрон. метод. вказівки для студентів ф-ту хімії та фармації / уклад. : Д. В. Снігур, О. М. Жуковецька, Р. Є. Хома. Одеса: Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2023. 22 с.
5. Методичні рекомендації до організації самостійної роботи з обов'язкової освітньої компоненти «Квантова хімія» для підготовки здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти / Укладачі Н. В. Кусяк, В. В. Листван, О.Ю. Кичкирук, О.В. Ходюк, Житомир: Вид-во ЖДУ ім. І. Франка, 2025. 43 с.

##### Допоміжна

1. Кусяк Н. В., Кичкирук О. Ю. Інструктивно-методичні матеріали до лабораторних занять з дисципліни «Квантова хімія» Житомир: Вид-во ЖДУ ім. І. Франка, 2024. 74 с.

#### Інформаційні ресурси

1. Кафедра хімії. URL: <https://kc.pnu.edu.ua>
2. Наукова бібліотека ПНУ. URL: <http://lib.pnu.edu.ua/>

#### 7. Контактна інформація

Кафедра	Хімії. Адреса : вул. Галицька, 201Б, ауд.308, <a href="mailto:chemistry@pnu.edu.ua">URL:chemistry@pnu.edu.ua</a>
Викладач	д.т.н., проф.. Курта Сергій Андрійович
Контактна інформація викладача	<a href="mailto:sergiykurta@pnu.edu.ua">sergiykurta@pnu.edu.ua</a> , <a href="mailto:serhii.kurta@cnu.edu.ua">serhii.kurta@cnu.edu.ua</a>

### 8. Політика навчальної дисципліни

<b>Академічна доброчесність</b>	Політика ректорату спрямована на академічну доброчесність, прозорість та законність діяльності. Задля цього розроблено та впроваджено «Положення про запобігання академічного плагіату», «Положення про Комісію з питань етики та академічної доброчесності», «Кодекс честі «Карпатський національний університет імені В. Стефаника» та опубліковано їх на сайті. Викладеними в цих документах принципами (відповідальності, справедливості, академічної свободи, взаємоповаги, безпеки і добробуту, законності) та правилами поведінки студентів і працівників університету, які базують на відповідних законах, цим керується кафедра хімії. В університеті діє «Гаряча лінія» з ректором, «Телефон довіри», більшість вступних іспитів проводиться за комп'ютерно-тестовими технологіями, а іспит за допомогою онлайн-трансляції можна переглядати у реальному часі. Діяльність кафедри ректорату з питань запобігання та виявлення корупції здійснюється на основі чинного законодавства України.
<b>Пропуски занять</b>	Відпрацювання пропущених лабораторних занять відбувається за погодженням з викладачем, враховуючи графік консультацій з навчальної дисципліни, за винятком поважної причини у студента (документальне підтвердження).
<b>Виконання завдання пізніше встановленого терміну</b>	Завдання, виконані після зазначеного терміну для виконання, не перевіряються, тобто оцінюються в 0 балів, за винятком поважної причини у студента (документальне підтвердження).
<b>Невідповідна поведінка під час заняття</b>	Вирішується згідно чинного законодавства України, Статуту університету. Під час дистанційного навчання у викладача є прохання щодо ввічливих відео під час онлайн-конференцій.
<b>Відповідь викладача</b>	Відповідь на роботу, яка надіслана на електронну пошту, Viber студент отримує впродовж доби. Оцінки можна дізнатися за зверненням до викладача (скріншот чи фото).
<b>Додаткові бали</b>	Виставляються під час активної участі на заняттях, відповіді на додаткові питання, підготовки презентацій за даною тематикою.
<b>Неформальна освіта</b>	-

Викладач \_\_\_\_\_ КС \_\_\_\_\_ професор д.т.н. Курта С.А.