

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ФАКУЛЬТЕТ БІОЛОГІЧНИЙ  
КАФЕДРА ХІМІЇ

ЗАТВЕРДЖУЮ

Декан \_\_\_\_\_ факультету

Л.О. Омелянчик

(підпис)

(ініціали та прізвище)



» \_\_\_\_\_ 2019

**Квантова хімія**

(назва навчальної дисципліни)

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
підготовки бакалаврів  
(назва освітнього ступеня)  
спеціальності 102 Хімія  
(шифр, назва спеціальності)  
освітньо-професійної програми Хімія

Укладач /Укладачі: к. хім. н., доцент Синяєва Ніна Петрівна

Обговорено та ухвалено  
на засіданні кафедри Хімії

Протокол № 1 від "28" "08" 2019 р.

Завідувач кафедри

(підпис)

О.А. Франско  
(ініціали, прізвище)

Ухвалено науково-методичною радою  
факультету біологічного

Протокол № 1 від "30" "08" 2019р.

Голова науково-методичної ради факультету

(підпис)

Н.М. Приступа  
(ініціали, прізвище)

2019 рік

## 1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, спеціальність, освітня програма, рівень вищої освіти,	Характеристика навчальної дисципліни
		<b>денна форма навчання</b>
Кількість кредитів - 6	Галузь знань <u>10 Природничі науки</u>	Нормативна
		Цикл професійної підготовки
Загальна кількість годин - 180	Спеціальність <u>102 Хімія</u> <u>Освітньо-професійна програма</u> <u>Хімія</u>	<b>Рік підготовки:</b>
		3-й
		<b>Лекції</b>
Тижневих аудиторних годин для денної форми навчання: аудиторних – 6 Самостійної роботи студента -9	Рівень вищої освіти: <b>Бакалаврський</b>	28 год.
		<b>Лабораторні</b>
		56 год.
		<b>Самостійна робота</b>
		96 год.
		<b>Вид контролю:</b> екзамен

## 2. Мета та завдання навчального курсу

**Метою** викладання навчальної дисципліни «Квантова хімія» є формування у студентів біологічного факультету системи практичних умінь з використанням основних методів квантової хімії, розвиток у них умінь і навичок проводити прості квантово-механічні розрахунки, що є фундаментом для подальшого вивчення квантових явищ у фізичній хімії, фізико-хімічних методах дослідження складу речовин. Знання, набуті під час вивчення курсу, є потрібними для подальшої професійної діяльності фахівця-хіміка.

**Основними завданнями** дисципліни «Квантова хімія» є засвоєння та вміння використовувати теоретичні навички для самостійного вирішення науково-дослідних та практичних задач, основних понять квантової механіки, математичного апарату квантової хімії, вивчення теорії молекулярного зв'язку, основних положень методу молекулярних орбіталей, який необхідний для подальшого вивчення і розуміння методів дослідження структури молекул, їх симетрії та методів ідентифікації сполук, більш ефективного вивченню теоретичних питань та набуттю професійних якостей при прогнозуванні новітніх технологій

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен **знати**:

- Основні положення квантової хімії і квантової механіки
- Квантові теорії утворення хімічного зв'язку
- Особливості рівняння Шреденгера та методу його рішення для молекул та їх молекулярних орбіталей
- Будову та властивості молекул координаційних сполук; теорію молекулярних орбіталей та валентного зв'язку
- Квантової теорії хімічних орбіталей

**Уміти**:

- Пояснювати рисунки, схеми з зображенням енергетичних рівнів, квантових переходів електронів, електронних орбіталей
- Складати та пояснювати енергетичні діаграми рівнів утворення двохатомних та багатоатомних молекул
- Використовувати в засвоєні дисципліни можливості фармацевтичних технологій
- Використовувати методи математичної обробки даних
- Використовувати програмне забезпечення при моделюванні молекул речовин
- Користуватись розрахунковими формулами і вирішувати задачі по квантовій хімії
- Самостійно проводи дослідницькі роботи

Навчальна дисципліна «Квантова хімія» забезпечує студентам знання і компетентності необхідні для визначання структури молекул, властивостей речовин, синтез нових сполук з певними запрограмованими властивостями за допомогою полумпіричних методів.

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми студенті повинні досягати таких **компетентостей**:

- Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК1)
- Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями (ЗК 2)
- Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК 5)
- Здатність до пошуку, обробленню та аналізу інформації з різних джерел (ЗК 10)
- Здатність застосовувати знання і розуміння математичних та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем хімії

(СК1)

- Здатність розпізнавати і аналізувати проблеми застосовувати обґрунтовані (чи доцільні) методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії (СК2)
- Здатність здійснювати кількісним вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і практично оцінювати експериментальні дані (СК8)
- Здатність оцінювати опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання (СК10)
- Розуміння ключових хімічних понять, основних фактів, концепцій принципів, теорій що стосується природничих наук та наук про життя і земля для забезпечення можливості розуміння спеціальних областей хімії (СК12)
- Навички в практичному застосуванні теоретичних відомостей (СК14)

Результатом оволодіння навчальною дисципліною є здобуття фундаментальних знань в області хімію, можливість працювати хіміком-дослідником, хіміком-технологом на науковмісних технологіях.

### **Міждисциплінарні зв'язки**

Вивчення дисципліни «Квантова хімія» ґрунтується на знаннях студентів набутих у процесі навчання математиці, фізики, фізичної та колоїдної хімії, кристалохімії, органічної хімії

Навчальна дисципліна «Квантова хімія» забезпечує і є фундаментальною для вивчення дисципліни «Фізико-хімічні дослідження», теорії синтезу новітніх сполук з прогнозованими властивостями та спеціальних курсів хімії та подальшою професійної діяльності хіміка-технолога та теоретика

## **3. Програма навчальної дисципліни**

### **Розділ 1. Основи квантової механіки**

**Тема 1.** *Вступ до квантової теорії. Корпускулярно-хвильовий дуалізм.*

Електромагнітне випромінювання. Гіпотеза Планка. Фотоефект внутрішній, зовнішній. Ефект Комптона. Гіпотеза де Бройля. Хвильова механіка Шредінгера, принцип невизначеності Гейзенберга. Основні принципи квантової механіки.

## **Тема 2.** *Основні постулати квантової механіки. Постулат 1.*

Хвильова функція, її інтерпретація та властивості хвильової функції. Імовірна інтерпретація хвильової функції. Умови нормування. Густина ймовірності розподілу частинок у просторі, електронна густина. Постулат 2. Оператори спостережуваних фізичних величин. Оператори координати, імпульсу, кутового моменту і його компонент, кінетичної та потенційної енергії. Оператор Гамільтона. Постулат 3. Рівняння Шредінгера. Нестационарне рівняння Шредінгера. Стационарний стан і його властивості. Стационарне рівняння Шредінгера. Постулат 4. Принцип суперпозиції. Імовірність результатів вимірювання фізичних величин, їх середнє значення. Закони збереження у квантовій механіці.

## **Тема 3.** *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.

## **Тема 4.** *Квантовий осцилятор.*

Рух у центральному полі сил. Гармонічний осцилятор. Рух частинки в кулонівському полі сил. Квантовий осцилятор. Хвильові функції квантового осцилятора. Поліноми Ерміта і хвильових функцій квантового осцилятора. Вузлові точки хвильових функцій гармонічного осцилятора. Енергетичні рівні гармонічного осцилятора та їх еквідистантність.

## **Тема 5.** *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.

## **Розділ 2. Основні методи квантової хімії.**

### **Тема 1. Молекулярне рівняння Шредінгера.**

Адіабатичне наближення. Поверхня потенційної енергії. Електронна будова молекулярних систем. Стаціонарне 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 2. Опис коливань молекул у гармонічному наближенні.**

Обертальний стан молекул. Типи молекулярних вивертків. 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 3. Молекулярний іон водню.**

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  $\text{H}_2^+$ . Енергетична діаграма іону водню. Одиниці енергії та довжини.

### **Тема 4. Метод молекулярних орбіталей Хюккеля.**

Основні наближення і обчислювальна схема методу молекулярних орбіталей Хюккеля.  $\pi$ -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 5. Симетрія молекулярних орбіталей.**

Визначення груп симетрії. Елементи та операції симетрії. Точкові групи симетрії молекул (номенклатура Шенфліса, класифікація). Генератори точкових груп. Скінчені та неперервні точкові групи. Побудова симетризованих МО ЛКАО. Збереження орбітальної симетрії в хімічних реакціях. Симетрія реагентів і продуктів реакції. Кореляційні діаграми. Роль кореляційних діаграм у теорії узгоджених реакцій. Основні дії при їх побудові. Правила Вудворда-Хоффмана. Правила відбору.

**Тема 6. Простий метод. 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.

#### 4. Структура навчальної дисципліни

Назви тем змістових модулів	Кількість годин					
	денна форма					
	усього	у тому числі				
		л	с/п	лаб	інд	с.р.
1	2	3	4	5	6	7
<b>Розділ 1. Основи квантової</b>						
1. Вступ до квантової теорії. Корпускулярно-хвильовий дуалізм.	14	2	-	4	-	8
2. Основні постулати квантової механіки.	16	4	-	4	-	8
3. Модельні квантово-механічні задачі.	18	2	-	8	-	8
4. Квантовий осцилятор.	14	2	-	4	-	8
5. Квантування кутового	16	4	-	4	-	8

моменту.						
Разом за розділом 1	78	14	-	24	-	40
<b>Розділ 2. Основні методи квантової хімії</b>						
1. Молекулярне рівняння Шредінгера. Адіабатичне наближення. Поверхня потенційної енергії	16	4	-	4	-	8
2. Опис коливань молекул у гармонічному наближенні	18	2	-	8	-	8
3. Молекулярний іон водню	14	2	-	4	-	8
4. Метод молекулярних орбіталей Хюкеля	20	2	-	8	-	10
5. Симетрія молекулярних орбіталей	18	2	-	4	-	12
6. Простий метод. Метод валентних зв'язків для багато багатоатомних молекул	16	2	-	4	-	10
Разом за розділом 2	102	14	-	32	-	56
Усього годин	180	28	-	56	-	96



## 5. Теми лекційних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	2	3
1	Вступ до квантової теорії. Корпускулярно-хвильовий дуалізм.	2
2	Основні постулати квантової механіки.	4
3	Модельні квантово-механічні задачі.	2
4	Квантовий осцилятор.	2
5	Квантування кутового моменту.	4
6	Молекулярне рівняння Шредінгера. Адіабатичне наближення. Поверхня потенційної енергії.	4
7	Опис коливань молекул у гармонічному наближенні.	2
8	Молекулярний іон водню.	2
9	Метод молекулярних орбіталей Хюкеля.	2
10	Симетрія молекулярних орбіталей.	2
11	Простий метод. Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул.	2
	<b>Усього</b>	<b>28</b>

## 6. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	2	3
1	<b>Вступ до квантової теорії. Корпускулярно-хвильовий дуалізм.</b> Теорія Бора та атомні спектри.	4
2	<b>Основні постулати квантової механіки.</b> Оператори в квантовій механіці.	4
3	<b>Модельні квантово-механічні задачі.</b> Стационарне рівняння Шредінгера для модельних задач. Обчислення середніх значень оператора. Координати для модельних задач.	8
4	<b>Квантовий осцилятор.</b> Лінійний гармонічний осцилятор.	4
5	<b>Квантування кутового моменту.</b> Колівальний спектр двуатомної молекули.	4
6	<b>Молекулярне рівняння Шредінгера. Адіабатичне наближення.</b> <b>Поверхня потенційної енергії.</b> Енергетична діаграма молекулярних орбіталей.	4
7	<b>Опис коливань молекул у гармонічному наближенні.</b> Симетрія молекулярних орбіталей.	8
8	<b>Молекулярний іон водню.</b> Молекулярний іон водню.	4
9	<b>Метод молекулярних орбіталей Хюкеля.</b> Використання молекулярної симетрії у розрахунку методом Хюкеля.	8
10	<b>Симетрія молекулярних орбіталей.</b> Опис коливань молекул у гармонічному наближенні.	4
11	<b>Простий метод. Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул.</b> Спін основного стану альтернативних молекул з спряженими зв'язками.	4
	<b>Усього</b>	<b>56</b>

## 7. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	2	3
1	Вступ до квантової теорії. Корпускулярно-хвильовий дуалізм.	8
2	Основні постулати квантової механіки.	8
3	Модельні квантово-механічні задачі.	8
4	Квантовий осцилятор.	8
5	Квантування кутового моменту.	8
6	Молекулярне рівняння Шредінгера. Адіабатичне наближення. Поверхня потенційної енергії.	8
7	Опис коливань молекул у гармонічному наближенні.	8
8	Молекулярний іон водню.	8
9	Метод молекулярних орбіталей Хюкеля.	10
10	Симетрія молекулярних орбіталей.	12
11	Простий метод. Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул.	10
	Усього	96

### Індивідуальне завдання

Індивідуальне завдання є частиною підсумкового контролю і складається зі збору та аналізу зарубіжного та вітчизняного досвіду що до будови молекул з основами квантової хімії, квантових теорій, утворення хімічного зв'язку, квантової теорії хімічних реакцій.

Виконання індивідуального завдання сприятиме актуалізації знань студентів отриманих ними та допоможе виробити необхідні вміння пов'язані з подальшою професійною діяльністю. Оформлюється на стандартних аркушах паперу формату А4, може бути написано зрозумілим почерком, або надруковано. Обсяг не менше 10-15 сторінок.

*Робота повинна містити такі розділи:*

1. Вступ.
2. Основна частина є власне дослідження, яке виконується за таким планом:
  - Особливості становлення квантової механіки, квантової хімії
  - Сучасна інтерпретація квантової теорії
  - Основні принципи квантово-механічного опису
  - Порівняльний аналіз сучасних теорій
3. Висновок
4. Список використаної літератури (подається в алфавітному порядку)

## 8. Види контролю і система накопичення балів

При викладанні навчальної дисципліни «Квантова Хімія» використовується поточний і підсумковий контроль навчальних досягнень студентів. Контроль і оцінювання навчальної діяльності студентів здійснюється за 100-бальною шкалою. Співвідношення між поточним і підсумковим контролем у загальній оцінці навчальної діяльності студента з дисципліни становить **60:40**.

	<i>Вид контрольного заходу</i>	<i>Кількість контрольних заходів</i>	<i>Кількість балів за 1 захід</i>	<i>Усього балів</i>
1	Виконання завдань лабораторної роботи. Терміни виконання - тиждень після практичного заняття	14	2	28
2	Виконання завдань атестаційної контрольної роботи в письмовій формі (проводиться на атестаційному тижні)	2	12	24
3	Самостійне проходження тестів за матеріалом у системі електронного забезпечення навчання ЗНУ. Кількість спроб - 1.	2	4	8
4	Підсумковий контроль- екзамен	Індивідуальне завдання	15	40
		Екзаменаційне випробування у письмовій формі за білетами (проводиться під час сесії)	1	
<b>Усього</b>		19		100

**Поточний контроль** передбачає проведення лабораторних занять в аудиторії та оцінювання виконання лабораторних робіт.

Лабораторне заняття складається з двох частин: **перша частина** - теоретична, передбачає перевірку володіння студентами теоретичними положеннями та застосування їх під час виконання практичних завдань і розв'язання задач, виявлення ступеня засвоєння теоретичного матеріалу; **друга частина**, експериментальна, включає виконання лабораторної роботи й оформлення звіту. Виконання лабораторних робіт передбачає виконання практичного завдання. Лабораторна робота має бути запротокольована у лабораторному журналі та здана викладачеві до встановленого планом терміну. Оцінка за лабораторне заняття виставляється так: **0-1,5 бали** - за оформлення, виконання лабораторної роботи, її захист; **0-3 бали** - за оформлення домашнього завдання та робота на парі (теорія). Максимально протягом семестру студент отримує **24 бали**.

Після вивчення кожного розділу студенти самостійно проходять **контрольне тестування** в електронному вигляді в системі MOODLE. Можна отримати в **кожному розділі 0-4 бали**. Максимальна кількість балів - **8 балів**.

Виконання студентами завдань двох атестаційних контрольних робіт за варіантами в позанавчальний час. Кожна контрольна робота складається з 5-х практичних завдань, що визначають рівень оволодіння студентами знаннями, уміннями і навичками. Максимально можна отримати **до 14 балів**.

**Підсумковий контроль** складається з **індивідуального завдання** (максимально 15 балів) і проведення **іспиту** в письмовій формі (максимально 25 балів); тривалість іспиту 2 академічні години. Екзаменаційний білет складається з 5-х питань: 1-е, 2-е, 3-є питання - теоретичні (максимально по 6 балів), 4-е та 5-е питання - тестове практичне завдання (максимально 3,5 бали).

Результати виконання студентом індивідуального завдання оцінюються за наступною шкалою:

**Вступ(1 бал):** формулювання необхідності зазначених знань для професійного становлення майбутнього хіміка.

**Основна частина (1-12 балів):** повнота розкриття питання (1-4 бали); опрацювання сучасних наукових інформаційних джерел (1-4 бали); цілісність, систематичність, логічна послідовність викладу (1-4 бали).

**Висновки (1 бал):** уміння формулювати власне ставлення до проблеми, робити аргументовані висновки.

Акуратність оформлення письмової роботи **(1 бал)**.

Загальна оцінка визначається як сума балів, отриманих студентом по кожному пункту. Виконання індивідуального завдання оцінюється **0-15 балів**.

До складання **іспиту** допускаються студенти, які набрали мінімально 35 балів з 60 можливих.

### Шкала оцінювання: національна та ECTS

За шкалою ECTS	За шкалою університету	За національною шкалою	
		Екзамен	Залік
A	90 - 100 (відмінно)	5 (відмінно)	Зараховано
B	85 -89 (дуже добре)	4(добре)	
C	75-84 (добре)		
D	70 - 74 (задовільно)	3 (задовільно)	
E	60 - 69 (достатньо)		
FX	35-59 (незадовільно - з можливістю повторного складання)	2 (незадовільно)	Не зараховано
F	1 - 34 (незадовільно - з обов'язковим повторним курсом)		

### 13.Рекомендована література

#### Основна

1. Yong D. C. Computational Chemistry, Wiley Interscience. New York, 2001. 370 p.
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия / Виктор Иванович Барановский. - М.: Академия, 2008. - 384 с.
3. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. Пер. с англ. - М.: Мир, 2001. - 532
4. Вакарчук І.О. Квантова механіка / Іван Олександрович Вакарчук - Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2004. - 784 с.
5. Ворошилов Ю.В., Павлишин В.И. Основы кристаллографии и кристаллохимии. Рентгенография кристаллов: Учебник. К.: КНТ, 2011. -568 с.
6. Кларк Т. Компьютерная химия. –М.: Мир,1990. -320 с.
7. Салихов К.М. 10 лекций по спиновой химии, Казань: УНИПРЕСС, 2000. - 152 с.
8. Слета Л.О., Иванов В.В. Квантова хімія - Харків: Гімназія, 2008. - 443 с.
9. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. - М.: Изд-во МГУ, 2001.
10. Юхновський І.Р. Основи квантової механіки / Іван Романович Юхновський - К.:с.Либідь, 2002. - 390 с.

#### Додаткова

1. Галицкий В.М. Задачи по квантовой механике / Владимир Михайлович Галицкий - М.: Наука, 1981. - 648 с.
2. Грибов Л. А., Муштакова С. П. Квантовая химия. - Гардарика, 1999. - 389 с.
3. Губанов В.А., Жуков В.П., Литинский А.О. Полуэмпирические методы молекулярных орбиталей в квантовой химии.-М.: Наука, 1976. - 219 с.
4. Дмитриев И.С. Электрон глазами химика / Иван Сергеевич Дмитриев - Л.: Химия, 1986.-228 с.
5. Зоркий П. М., О фундаментальных понятиях в химии //Соровский образовательный журнал, 1996, №9. - С. 47-56.
6. Картмеля Э. Валентность и строение молекул. / Под ред. М.В. Базилевского. — М.: Химия, 1978. - 368 с.
7. Клета Л.А. Уманский В.Э. Вычислительные методы в квантовой химии, Учебное пособие.- Харьков ХТУ, 1979
8. Ландау Л.Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Учебное пособие для студентов. - М.: Наука. 1974 - 368 с.
9. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Минаев Р.М. Теория строения молекул. Ростов на Дону: Феникс, 1997. - 560 с.
10. Молекулярные структуры. Прецизионные методы исследования.

- / Под ред. Доминико, И. Харчиттам. Пер. с англ. - М.: Мир, 1997. - 672 с.
11. Самм Л. Электроны в химических реакциях. Пер. с англ. - М.: Мир, 1985. - 285 с.
12. Яцимирский В.К., Яцимирский К.Б. Хімічний зв'язок. - К.: Вища школа, 1993. - 309 с.

### Інформаційні ресурси

1. <http://www.irbis-nbuv.gov.ua/>: Національна бібліотека України ім. В.І. Вернадського.
2. <http://www.Biblioteka.cc.>indx.php?newsid=75039>: Библиотека.
3. <http://www.chem.msu./rus/elibrary/reqios.html>: Электронная библиотека по химии. Ресурс региональных университетов.
4. <http://www.ilkharkov.ua/bvi/oqurtsov/oqurtsov.htm>: Учебники, Харьков.
5. <http://www.libmexmat.ru/books/758/>: Электронная библиотека.
6. <http://www.ximicat.com/info.php>: Химия.
7. [https://books.google.com.ua/books/about/Modern\\_Quantum\\_Chemistry.html?id=KQ3DAgAAQBAJ&redir\\_esc=y](https://books.google.com.ua/books/about/Modern_Quantum_Chemistry.html?id=KQ3DAgAAQBAJ&redir_esc=y)
8. [https://books.google.com.ua/books/about/Quantum\\_chemistry\\_and\\_spectroscopy.html?id=BGcvAQAAIAAJ&redir\\_esc=y](https://books.google.com.ua/books/about/Quantum_chemistry_and_spectroscopy.html?id=BGcvAQAAIAAJ&redir_esc=y)
9. <https://www.goodreads.com/book/show/45135807-ideas-of-quantum-chemistry>

Погоджено \_\_\_\_\_

Навчальний відділ

« \_\_\_\_\_ »

**Додаток**  
(роздруковується у разі внесення змін !!!  
із новою програмою роздруковувати не слід)

**Доповнення та зміни до робочої програми навчальної дисципліни**  
**«Квантова хімія»**  
(назва)

Протокол засідання кафедри (дата та номер)	Внесені зміни	Підпис завідувача кафедри, дата