

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра прикладної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної  
роботи

\_\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2022 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

**Квантово-хімічні методи біофізики**

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти другий (магістерський) рівень

галузь знань 10 Природничі науки

спеціальність 153 Мікро- та наносистемна техніка

освітня програма Фізична та біомедична електроніка

вид дисципліни за вибором

спеціалізація \_\_\_\_\_

факультет радіофізики, біомедичної електроніки та комп’ютерних систем

2022 / 2023 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету  
 “\_\_” \_\_\_\_\_ 2022 року, протокол №\_\_

**РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:**

Токарев Віктор Володимирович, к.х.н., старший викладач кафедри прикладної хімії

Програму схвалено на засіданні кафедри прикладної хімії  
 “\_\_” серпня 2022 року, протокол №\_

Завідувач кафедри прикладної хімії

\_\_\_\_\_ Чебанов В. А.  
 (підпис) (прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньої (професійної/наукової) програми (керівником  
 проектної групи) \_\_\_\_\_  
 назва освітньої програми

Гарант освітньої (професійної/наукової) програми  
 (керівник проектної групи) \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ (підпис) \_\_\_\_\_ (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією  
радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем  
 назва факультету, для здобувачів вищої освіти якого викладається навчальна дисципліна

Протокол від “\_\_” \_\_\_\_\_ 20\_\_ року №\_\_

Голова методичної комісії \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ (підпис) \_\_\_\_\_ (прізвище та ініціали)

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “**Квантово-хімічні методи біофізики**” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки другого рівня вищої освіти – магістр спеціальності 153 «Мікро- та наносистемна техніка».

### 1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є формування уявлення про методи, за допомогою яких розраховують електронну будову атомів та молекул, сформуванню вміння самостійно розраховувати електронну будову молекулярних систем з використанням сучасних квантово-хімічних обчислювальних програм, вміння оцінювати адекватність використаних квантово-хімічних методів.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є формування у здобувачів вищої освіти такі загальні та фахові компетентності:

**загальні:**

- 1) здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу; (ЗК-1)
- 2) здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел; (ЗК-5)
- 3) здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. (ЗК-10)

**фахові компетентності:**

1) здатність аналізувати та синтезувати мікро- та наноелектронні системи різного призначення; (СК-3)

4) здатність розробляти, обґрунтовано вибирати і використовувати сучасні методи обробки та аналізу сигналів в мікро- і наноелектронних приладах та системах; (СК-4)

5) здатність аргументувати вибір методів розв’язання складних задач і проблем мікро- та наносистемної техніки, критично оцінювати отримані результати та аргументувати прийняті рішення; (СК-5)

6) здатність користуватися сучасними системами пошуку та аналізу науково-технічної інформації, проводити патентний пошук і дослідження та здійснювати захист інтелектуальної власності; (СК-6)

7) здатність розробляти і реалізовувати наукові та/або інноваційні проекти у сфері мікро- та наносистемної техніки, а також дотичні до неї міждисциплінарні проекти; (СК-7)

8) здатність самостійно опановувати нову апаратуру та технології, в тому числі із суміжних галузей, для розв’язання виробничих задач. (СК-8)

1.3. Кількість кредитів: **4**.

1.4. Загальна кількість годин: **120**.

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна / за вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
1-й	-
Семестр	
3-й	-
Лекції	
32 год.	-
Практичні, семінарські заняття	
16 год.	-

Лабораторні заняття	
-	-
Самостійна робота	
62 год.	-
Індивідуальні завдання	
10 год.	

#### 1.6. Заплановані результати навчання

1) Формулювати і розв'язувати складні інженерні, виробничі та/або наукові задачі під час проектування, виготовлення і дослідження мікро- та наносистемної техніки різноманітного призначення та створення конкурентоспроможних розробок, втілення результатів у бізнес-проектах; (P-1)

2) Оптимізувати конструкції систем, пристроїв та компонентів мікро- та наносистемної техніки, а також технології їх виготовлення; (P-3)

3) Застосовувати спеціалізовані концептуальні знання, що включають сучасні наукові здобутки, а також критичне осмислення сучасних проблем у сфері мікро- та наноелектроніки, для розв'язування складних задач професійної діяльності; (P-4)

4) Збирати необхідну інформацію, використовуючи науково-технічну літературу, бази даних та інші джерела, аналізувати і оцінювати її; (P-8)

5) Досліджувати процеси у мікро- та наноелектронних системах, приладах й компонентах з використанням сучасних експериментальних методів та обладнання, здійснювати статистичну обробку та аналіз результатів експериментів; (P-11)

6) Будувати і досліджувати фізичні, математичні і комп'ютерні моделі об'єктів та процесів мікро- та наноелектроніки; (P-12)

7) Забезпечувати захист інтелектуальної власності, комерціалізацію результатів науково-дослідної, винахідницької та проектної діяльності/ (P-15)

У результаті вивчення навчальної дисципліни «Квантово-хімічні методи біофізики» здобувачі вищої освіти мають **знати**

- теоретичні основи квантової теорії атомів та молекул, напівемпіричних та неемпіричних методів квантової хімії,

- основні припущення, розрахункову складність та недоліки розглянутих методів квантової хімії.

Студенти мають **вміти**:

- самостійно опанувати нові методи розрахунків та програмне забезпечення;

- вибрати квантово-хімічний метод для розрахунку електронних властивостей біомолекул та біополімерів;

- визначити обчислювальні ресурси, необхідні для такого розрахунку;

- провести валідацію та інтерпретацію отриманих результатів.

## 2. Тематичний план навчальної дисципліни

### Розділ 1. Основи квантової механіки молекул

**Тема 1.** Молекулярний гамільтоніан. Наближення Борна-Оппенгеймера та електронний гамільтоніан. Оптимізація геометрії молекул. Ефект Яна-Теллера. Перехід Паєрлса.

**Тема 2.** Двохатомна молекула у наближенні гармонічного осцилятора. Потенціал Леннарда-Джонса та ангармонічний осцилятор. Методи розрахунку коливального спектру молекул.

**Тема 3.** Наближення МО ЛКАО. Типи базисних наборів. Похибка суперпозиції базисного набору.

**Тема 4.** Варіаційний метод, метод лінійних комбінацій Релея-Рітца. Теорія збурень. Теорія середнього поля. Квантовий метод Монте-Карло.

**Тема 5.** Електронна будова спряжених вуглеводнів. Альтернантні та неальтернантні спряжені вуглеводні. Простий метод Хюккеля. Ароматичність та антиароматичність. Правило Хюккеля для ануленів. Ароматичність Мебіуса.

**Тема 6.** Модель Паризера-Парра-Попла. Модель Хаббарда. Перехід Мотта. Ієрархія ефективних моделей сильнокорельованих систем.

### Розділ 2. Основні методи квантової хімії

**Тема 7.** Метод Гартрі-Фока. Рівняння Рутаана. Пряма мінімізація одночастинкової матриці густини. Теорема Купманса. Теорема Бріллюена.

**Тема 8.** Теорія Томаса-Фермі. Теорія функціоналу густини. Теорема Хоєнберга-Кона. Рівняння Кона-Шема. Типи обмінно-кореляційних функціоналів.

**Тема 9.** Напівемпіричні методи квантової хімії. Проблема обчислювання інтегралів міжелектронного відштовхування. Наближення нульового диференційного перекриття. Ієрархія напівемпіричних методів квантової хімії.

**Тема 10.** Ефекти електронної кореляції в сполуках перехідних металів. Статична та динамічна електронна кореляція. Методи повної та часткової конфігураційної взаємодії. Метод мультikonфігураційного самоузгодженого поля.

**Тема 11.** Багаточастинкова теорія збурень. Метод зв'язаних кластерів. Метод валентних зв'язків. Теорія резонансу.

**Тема 12.** Хімічний зв'язок. Поняття хімічного зв'язку. Типи хімічних зв'язків. Трьохцентровий хімічний зв'язок. Гібридизація атомних орбіталей та геометрія молекул. Міжмолекулярні взаємодії.

**Тема 13.** Електронегативність. Порядок зв'язку. Кореляція між порядком та довжиною зв'язку. Електронна та спінова густина. Індокси реакційної здатності. Теорія атомів в молекулах. Аналіз електростатичного потенціалу.

### 3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб.	інд.	с. р.		л	п	лаб.	інд.	с. р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
<b>Розділ 1. Основи квантової механіки молекул</b>												
Разом за розділом 1	51	14	6			31						
<b>Розділ 2. Основні методи квантової хімії</b>												
Разом за розділом 2	69	18	10		10	31						
<b>Усього годин</b>	120	32	16		10	62						

### 4. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Розрахунок коливальних спектрів двоатомних молекул у ангармонічному наближенні. Розрахунок коливальних спектрів малих молекул та простих полімерів в гармонічному наближенні.	2
2	Наближені розрахунки енергетичного спектру модельних задач за допомогою теорії збурень та наближення середнього поля.	2
3	Розрахунки енергетичного спектру, розподілу зарядів у основному та збуджених станах модельних $\pi$ -електронних структур у рамках методу Хюккеля.	2
4	Розрахунки властивостей малих молекул в рамках моделей Гейзенберга та Габбарда.	2
5	Розрахунок рівноважної геометрії, електронної структури, ІЧ та спектру видимого світла біомолекул за допомогою методів Гартрі-Фока та теорії функціоналу густини.	2
6	Розрахунок оптимальної геометрії та спектрів з використанням напівемпіричних методів.	2
7	Розрахунок енергії іонізації, спорідненості до електрона, інших властивостей малих молекул методами повної конфігураційної взаємодії та зв'язаних кластерів.	2
8	Порівняльний розрахунок порядку зв'язку, зарядів та спінової густини на атомах. Аналіз міжмолекулярних взаємодій.	2
	Разом	16

## 5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Суть та область застосовності адіабатичного наближення.	2
2	В гармонічному наближенні вивести рівняння на власні значення, що визначає частоти коливань молекули.	2
3	Розрахунок коливальних спектрів малих молекул та простих полімерів в гармонічному наближенні.	4
4	Наближені розрахунки енергетичного спектру модельних задач за допомогою теорії збурень та наближення середнього поля.	2
5	Зрозуміти, в чому полягає наближення МО ЛКАО. Зрозуміти, що зображує та як побудувати енергетичну діаграму МО для двоатомної молекули.	2
6	Визначення енергій основного та першого збудженого стану, спінової та зарядової густини на атомах модельної спряженої $\pi$ -електронної системи за допомогою простого методу Хюккеля з використанням симетрії досліджуваної системи	4
7	Розрахунки властивостей моделей Хаббарда та Гейзенберга для малих молекул.	4
8	Область застосовності та обчислювальна складність методів RHF, ROHF та UHF. Типи обмінно-кореляційних функціоналів.	4
9	Ієрархія напівемпіричних методів	2
10	Знати розрахункову складність методу повної конфігураційної взаємодії. Розуміти причини, чому методи середнього поля не можуть описати магнітні та провідні властивості сильно корельованих сполук перехідних металів.	2
11	Підготовка до практичних занять	6
12	Підготовка до заліку	6
	Разом	40

**6. Індивідуальні завдання:** розрахунково-графічна робота, що полягає в порівняльному розрахунку та візуалізації фізико-хімічних властивостей індивідуальних біомолекул з використанням вільно доступного квантово-хімічного програмного забезпечення (Avogadro, ORCA, psi4, NWChem та ін.). За відсутності обчислювальної техніки студент може отримати доступ до розрахункових можливостей кафедри прикладної хімії або допомогу у використанні Google Colab/ChemCompute.

## 7. Методи навчання

- Усні методи: лекція, пояснення; бесіда; дискусія;
- Робота з навчальною та науковою літературою (підручниками, науковими журналами), самостійна робота.
- Методи спостереження: методи ілюстрацій, методи візуалізації, методи демонстрацій. Лекції передбачають викладення теоретичного матеріалу та присвячені основним методам наближеного розв'язку нерелятивістського рівняння Шредінгера та фізичним припущенням щодо, на яких вони ґрунтуються.  
Лекції ілюстровані таблицями, наочним матеріалом у вигляді рисунків, схем, фотографій та представлені у формі мультимедійних презентацій, що дає можливість проводити заняття у дистанційній формі.
- При вивченні методів, наближень, ефектів наводяться відповідні терміни, що їх застосовують в міжнародній англомовній науковій літературі.

**Практичні завдання** полягають у розв'язанні задач проблемного характеру за темами лекцій, числових оцінках ступеню прояву фізичних ефектів, оцінках можливості врахування або знехтування ефекту в конкретних умовах. Під час практичних занять обговорюються проблемні питання застосування наближених методів розв'язку рівняння Шредінгера та ілюструються за допомогою розв'язання відповідних задач з використанням модельних гамільтоніанів з реалістичними параметрами та обчислювальної техніки.

**8. Методи контролю:** розв'язання задач на практичних заняттях, контрольні роботи, індивідуальна розрахунково-графічна робота, залік.

Самоконтроль здійснюється студентами при виконанні завдань для самопідготовки та самоконтролю по кожному розділу курсу, з використанням підручників, методичних посібників з відповідних розділів курсу, іншої додаткової літератури чи джерел в мережі Інтернет.

#### **Оцінювання поточної навчальної діяльності**

Поточний контроль засвоєння студентами матеріалів лекцій та виконання завдань для самостійної роботи здійснюється на практичних заняттях та перед початком кожної лекції.

*Максимальна кількість балів*, яку може набрати студент за поточну навчальну діяльність при вивченні дисципліни, становить 60 балів.

*Мінімальна кількість балів*, яку повинен набрати студент за поточну навчальну діяльність при вивченні дисципліни для допуску до складання підсумкового контролю (заліку) становить 30 балів.

Розрахунок кількості балів проводиться на підставі отриманих студентом оцінок за традиційною шкалою під час вивчення дисципліни. Сума отриманих балів дорівнює відношенню загальної кількості набраних балів до максимальної кількості балів, помножене на 30 та округлене до більшого цілого числа.

Програма передбачає наступні форми поточного контролю:

— *експрес-контроль* слугує для перевірки засвоєння студентами тем лекційної частини курсу та теоретичних питань, що вивчаються студентами самостійно. Проводиться протягом семестру у вигляді коротких (до 5 хв.) тестових завдань, що складаються з 2-4 питань. Відповідь на кожне запитання оцінюється балами (від 0 до 5) відповідно до повноти та правильності відповіді. Кількість балів за кожен експрес-тест розраховується за формулою:

$$ЕТБ=0.5*(\text{сумарна кількість балів, отримана студентом за експрес-тест})/(5*\text{кількість питань})$$

— *розв'язання задач*: проводиться у формі індивідуального розв'язання розрахункових задач за темою поточного практичного заняття, з вільною формою відповіді та обмеженням по часу в 10 хв. Відповідь та розв'язок завдання оцінюється балами в діапазоні від 0 до 5. Кількість балів за кожен задачу розраховується за формулою:

$$РЗБ=1.5*(\text{сумарна кількість балів, отримана студентом за розв'язання задачі})/5$$

— *домашні завдання*: розрахункові задачі за темою практичного завдання, що містять декілька (2-5) питань та виконуються студентом самостійно. Відповідь на кожне питання в завданні оцінюється балами в діапазоні від 0 до 5. Час виконання домашніх завдань обмежений 2 тижнями. Для завдань, зданих після цього строку, кількість балів зменшується на 50%. Максимальна кількість балів за домашнє завдання розраховується за формулою:

$$ДЗБ=3*(\text{сумарна кількість балів, отримана студентом за розв'язання задачі})/(5*\text{кількість питань})$$

Умовою допуску до заліку є виконання всіх контрольних робіт та індивідуального завдання.



**Підсумковий семестровий контроль.** Проводиться у формі заліку та передбачає письмову відповідь на теоретичні питання та розв'язування задач. Білет складається з 3 питань, максимальна сумарна оцінка за відповіді на питання становить 40 балів. Часткова відповідь на кожне питання знижує максимальну оцінку пропорційно повноті відповіді.

### 9. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота													Розрах.-граф. робота	Залік	Сума		
Розділ 1						Контрольна робота	Розділ 2									Контрольна робота	
T1	T2	T3	T4	T5	T6	8	T7	T8	T9	T10	T11	T12	T13	8	5	40	100
3	3	3	3	3	3		3	3	3	3	3	3	3				

### Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для чотирирівневої шкали оцінювання	для дворівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

#### Оцінювання письмової відповіді на теоретичне питання.

Вичерпна відповідь на кожне завдання зараховується як 5 балів. Часткова відповідь на кожне питання знижує максимальну оцінку з 5 балів до меншої кількості балів пропорційно повноті відповіді або пропорційно кількості суттєвих помилок у роботі:

- 5 балів – вичерпна та повна відповідь;
- 4 бали – відповідь правильна та містить усю необхідну інформацію, логічно побудована, але є неточності та/або упущення;
- 3 бали – відповідь задовільна та містить коректну інформацію, але відсутні аргументи, що пояснюють наведені твердження;
- 2 бали – студент виявляє поверхневі, загальні знання без аналізу змісту питання, хоча загальний напрямок роздумів правильний;
- 1 бал – текст містить окремі елементи правильної відповіді;
- 0 балів – відповідь повністю неправильна або відсутня.

#### Письмова відповідь (розв'язок задачі) також оцінюється за шкалою від 0 до 5 балів:

- 5 балів – задача розв'язана вірно. Наведені вихідні формули, проведені коректні розрахунки, розмірність результату розрахунку вказана коректно;
- 4 бали – задача розв'язана вірно. Наведені вихідні формули, проведені коректні розрахунки, розмірність результату розрахунку не вказана чи вказана коректно, або студент припустився несуттєвої помилки при розрахунках;
- 3 бали – задача розв'язана в принципі вірно, але розрахунки містять суттєву помилку;
- 1 бали – студент знає необхідні формули, проте не в змозі провести розрахунки;
- 0 бали – відповідь повністю неправильна або відсутня.

**Відповідь на теоретичне чи розрахункове питання домашнього завдання** також оцінюється за шкалою від 0 до 5 балів:

- 5 балів – відповідь коректна і повна. Вказана послідовність проведених розрахунків, дана їхня фізична інтерпретація, за необхідності наведені рисунки чи таблиці;

- 4 бали – відповідь коректна, але не повна. Не вказана або послідовність проведених розрахунків, або упущена їхня фізична інтерпретація, або необхідні ілюстративні матеріали;
- 3 бали – відповідь коректна, але закоротка. Не вказані деталі проведених розрахунків чи інші матеріали;
- 1 бали – відповідь невірна, містить грубі помилки в проведенні розрахунків чи інтерпретації їхніх результатів;
- 0 бали – відповідь повністю неправильна або відсутня.

### **Критерії оцінювання підсумкового семестрового контролю.**

До підсумкового контролю (заліку) допускаються студенти, які виконали всі види навчальних завдань, передбачені навчальною програмою, та при вивченні розділу набрали за поточну навчальну діяльність кількість балів, не меншу за мінімальну.

*Максимальна кількість балів, яку може набрати студент за результатами підсумкового семестрового контролю – 40, мінімальна кількість балів – 20.*

## **9. Рекомендована література**

### **Основна література**

1. Черановський В.О., Іванова К.Ф. Основи будови речовини. Навчальний посібник для студентів хімічного факультету – Харків: ХНУ, 2004. – 93 с.
2. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. – Харьков: Гімназія, 2008. – 443 с.
3. Jensen, Frank. Introduction to computational chemistry. – New York: Wiley, 1999. – 429 pp.
4. L. Piela. Ideas of Quantum Chemistry – Oxford: Elsevier Science & Technology, 2013. – 1330 pp.

### **Допоміжна література**

1. D. R. Yarkony (ed.). Modern Electronic Structure Theory (In 2 Parts). – Singapore: World Scientific, 1995.
2. A. Szabo, N. S. Ostlund. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. – New York: Dover Publications, 1996. – 466 pp.
3. I. Mayer. Simple Theorems, Proofs, and Derivations in Quantum Chemistry. - New York: Springer, 2003 — 337 с.
4. І. О. Вакарчук. Квантова механіка. - Львів: ЛНУ, 2012. - 827 с.

## **10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення**

1. <http://vergil.chemistry.gatech.edu/notes/>
2. <http://www.psicode.org/>
3. <https://pymol.org/>
4. <https://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/documentation.html>