



СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ «КВАНТОВА ХІМІЯ»

Компонента освітньої програми – обов'язкова (3 кредити)

Освітньо-професійна програма	Прикладна фізика та наноматеріали
Спеціальність	105 Прикладна фізика та наноматеріали
Галузь знань	10 Природничі науки
Рівень вищої освіти	Перший (бакалаврський)
Мова навчання	українська
Профайл викладача (-ів)	Маханець Олександр Михайлович - доктор фізико-математичних наук, професор кафедри термоелектрики та медичної фізики
Контактний тел.	+380506996707
E-mail:	o.makhanets@chnu.edu.ua
Сторінка курсу в Moodle	https://moodle.chnu.edu.ua/course/view.php?id=5934
Консультації	вівторок з 11.10 до 15.00

АНОТАЦІЯ 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.

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.

НАВЧАЛЬНИЙ КОНТЕНТ ОСВІТНЬОЇ КОМПОНЕНТИ

МОДУЛЬ 1. Основи квантової механіки	
Тема 1	Основні постулати квантової механіки.
Тема 2	Моделльні квантово-механічні задачі.
Тема 3	Квантування кутового моменту.
МОДУЛЬ 2. Методи квантової хімії.	
Тема 4	Молекулярне рівняння Шредінгера.
Тема 5	Коливання молекул у гармонічному наближенні.
Тема 6	Молекулярний йон гідрогену.
Тема 7	Метод молекулярних орбіталей Хюккеля.

ОСВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ, ФОРМИ ТА МЕТОДИ МЕТОДИ НАВЧАННЯ

У процесі вивчення навчальної дисципліни “Квантова хімія” використовуються інноваційні освітні технології: інформаційно-комунікаційні, технології студентоцентрованого навчання; традиційні та інтерактивні форми і методи навчання, серед яких: лекція-візуалізація, проблемна лекція, семінар-дискусія, семінар-діалог, самостійно-дослідницька робота та ін.

ФОРМИ Й МЕТОДИ КОНТРОЛЮ ТА ОЦІНЮВАННЯ

Поточний контроль: усне та письмове опитування, тестування, творча робота, проект, презентація та ін.

Підсумковий контроль – залік.

КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Оцінювання програмних результатів навчання здобувачів освіти здійснюється за шкалою європейської кредитно-трансферної системи (ECTS).

Критерієм успішного оцінювання є досягнення здобувачем вищої освіти мінімальних порогових рівнів (балів) за кожним запланованим результатом навчання

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-chernivetskohonatsionalnoho-universytetu.pdf> ;
- ✓ «Положенням про виявлення та запобігання академічного плагіату у Чернівецькому національному університету імені Юрія Федьковича» <https://www.chnu.edu.ua/media/n5nbzwgb/polozhennia-chnu-pro-plahi-at-2023plusdodatky-31102023.pdf> .

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.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>

Детальна інформація щодо вивчення курсу «Квантова хімія» висвітлена у робочій програмі навчальної дисципліни