

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

(повне найменування закладу вищої освіти)

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

(назва інституту/факультету)

Кафедра Кафедра термоелектрики та медичної фізики

(назва кафедри)

СИЛАБУС

навчальної дисципліни

Квантова хімія

(вказіть назву навчальної дисципліни (іноземною, якщо дисципліна викладається іноземною мовою))

обов'язкова

(вказати: обов'язкова)

Освітньо-професійна програма «Прикладна фізика та наноматеріали»

(назва програми)

Спеціальність № 105 – Прикладна фізика та наноматеріали

(вказати: код, назва)

Галузь знань 10 Природничі науки

(вказати: шифр, назва)

Рівень вищої освіти перший бакалаврський

(вказати: перший (бакалаврський)/другий (магістерський)/третій (освітньо-науковий))

інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук

(назва факультету/інституту, на якому здійснюється підготовка фахівців за вказаною освітньо-професійною програмою)

Мова навчання українська

(вказати: на яких мовах читається дисципліна)

Розробники: д.ф.-м.н., проф. Маханець О.М.

(вказати авторів (викладач (ів)), їхні посади, наукові ступені, вчені звання)

Профайл викладача (-ів) http://ptcsi.chnu.edu.ua/teachers/маханець-олександр-михайлович-2/

Контактний тел. +38 (050) 6996707

E-mail: o.makhanets@chnu.edu.ua

**Консультації Щотижня у вівторок з 11.00 до 12.00 год, корпус 8, 213 а.
Індивідуальні консультації (за попередньою домовленістю)**

1. Анотація дисципліни (призначення 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

2. Мета навчальної дисципліни. 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.

3. Пререквізити. 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.

4. Результати навчання

Вивчення навчальної дисципліни сприятиме формуванню таких загальних та фахових компетентностей.

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

ЗК1. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

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

ЗК 6. Здатність до проведення досліджень на відповідному рівні.

ЗК 9. Здатність працювати автономно.

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

ФК7. Здатність використовувати методи і засоби теоретичного дослідження та математичного моделювання в професійній діяльності.

Вивчення навчальної дисципліни забезпечує досягнення здобувачем наступних 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.

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

РН6. Відшукувати необхідну науково-технічну інформацію в науковій літературі, електронних базах, інших джерелах, оцінювати надійність та релевантність інформації.

5. Опис навчальної дисципліни

5.1. Загальна інформація

Назва навчальної дисципліни «Методи математичної фізики»												
Форма навчання	Рік підготовки	Семестр	Кількість			Кількість годин					Вид підсумкового контролю	
			кредитів	годин	змістових модулів	лекції	практичні	семінарські	лабораторні	самостійна робота		індивідуальні завдання
Денна	4	8	3	90		24	12			54		залік
Заочна												

5.2. Дидактична карта навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин												
	усього	денна форма					заочна форма						
		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	
Теми лекційних занять	Змістовий модуль 1. Онови квантової механіки												
<i>Тема 1. Основні постулати квантової механіки.</i>	12	4	2			6							
<i>Тема 2. Модельні квантово-механічні задачі.</i>	13	4	2			7							
<i>Тема 3. Квантування кутового моменту.</i>	9	1	1			7							
Разом за ЗМ1	34	9	5			20							
Теми лекційних занять	Змістовий модуль 2. Методи квантової хімії												
<i>Тема 4. Молекулярне рівняння</i>	12	3	2			7							

<i>Шредінгера.</i>												
Тема 5. <i>Коливання молекул у гармонічному наближенні.</i>	12	3	2			7						
Тема 6. <i>Молекулярний йон гідрогену.</i>	11	3	1			7						
Тема 7. <i>Метод молекулярних орбіталей Хюккеля.</i>	11	3	1			7						
Тема 8. <i>Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул.</i>	10	3	1			6						
Разом за змістовим модулем 2	56	15	7			34						
Усього годин	90	24	12			54						

5.3. Теми практичних занять

№	Назва теми
1	<i>Основні постулати квантової механіки.</i>
2	<i>Модельні квантово-механічні задачі.</i>
3	<i>Квантування кутового моменту.</i>
4	<i>Молекулярне рівняння Шредінгера.</i>
5	<i>Коливання молекул у гармонічному наближенні.</i>
6	<i>Молекулярний йон гідрогену.</i>
7	<i>Метод молекулярних орбіталей Хюккеля.</i>
8	<i>Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул.</i>

5.4. Зміст завдань для самостійної роботи

№	Назва теми
1	<i>Основні постулати квантової механіки.</i>
2	<i>Модельні квантово-механічні задачі.</i>
3	<i>Квантування кутового моменту.</i>
4	<i>Молекулярне рівняння Шредінгера.</i>
5	<i>Коливання молекул у гармонічному наближенні.</i>
6	<i>Молекулярний йон гідрогену.</i>
7	<i>Метод молекулярних орбіталей Хюккеля.</i>
8	<i>Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул.</i>

6. Система контролю та оцінювання

Види та форми контролю

Поточний контроль здійснюється під час проведення лекційних та практичних робіт і має на меті перевірку рівня підготовленості студента до виконання конкретної роботи.

При вивченні курсу «Квантова хімія» застосовуються методи усного контролю та задачі практичних завдань, серед яких слід виокремити: експрес опитування лекційного матеріалу, аудиторне розв'язування задач до теми, задача практичних робіт, проведення поточних контрольних робіт, тестування, перевірка виконання самостійних та індивідуальних завдань.

При здійсненні рубіжного модульного контролю застосовується метод письмового контролю – проведення модульних контрольних робіт.

Підсумковий контроль проводиться у письмовому вигляді і полягає у написанні екзаменаційних білетів, які структурно складаються з теоретичних завдань.

Засоби оцінювання

Засобами оцінювання та демонстрування результатів навчання є:

- усне опитування;
- стандартизовані тести;
- реферати;
- студентські презентації та виступи на наукових заходах;
- контрольні роботи;
- інші види індивідуальних та групових завдань.

Критерії оцінювання результатів навчання з навчальної дисципліни

Критерії оцінювання відповідей

З навчальної дисципліни проводиться семестровий залік. Студенти отримують завдання, що містить 2 теоретичні питання з дисципліни.

Оцінка «А» виставляється:

- коли студентом дані вичерпні та змістовні відповіді на всі запитання, які поставлені перед ним;
- коли у відповідях на поставлені запитання студент виявив глибоке розуміння мети і завдання курсу, а також сформулював відповіді своїми словами, а не за механічно завченою з підручника або посібника схемою.

Оцінка «В» виставляється:

- коли дані вірні відповіді на всі питання, але в окремих випадках допущені незначні неточності при формуванні основних задач, які поставлені в запитанні чи у записах аналітичних виразів при методичному аналізі курсу;
- коли відповіді на всі поставлені питання не досить повні.

Оцінка «С» виставляється:

- коли дана вірна відповідь на одне питання, але відповідь на друге становить не більше 50% відповідного програмного матеріалу;
- коли відповіді на всі поставлені питання не досить повні.

Оцінка «D» виставляється:

- коли відповіді на всі запитання вірні, але не повні і становлять не більше 50% відповідного програмного матеріалу;
- коли відповідь вірна і становить більше 50% програмного матеріалу, але містить суттєві помилки у формуванні задач і завдань курсу, а також у формулюваннях записів формул.

Оцінка «E» виставляється:

- коли відповідь на одне запитання вірна, але не повна і становить не більше 50% відповідного програмного матеріалу, а відповідь на друге містить суттєві помилки у формуванні задач і завдань курсу, а також у формулюваннях записів формул.

Оцінка «незадовільно» («FX» за системою ECTS) виставляється:

- коли у відповіді студента наявні суттєві помилки, що свідчать про нерозуміння ним основних понять та завдань курсу, а також нерозуміння студентом процесів та явищ про які йдеться у запитаннях;
- коли відповіді студента дуже поверхові, уривчасті, непослідовні й неточні та виявляють незнання студентом програмного матеріалу;

- коли студент не відповів на жодне отримане запитання.

Шкала оцінювання: національна та ЄКТС

Оцінка за національною шкалою	Оцінка за шкалою ECTS	
	Оцінка (бали)	Пояснення за розширеною шкалою
Відмінно	A (90-100)	відмінно
Добре	B (80-89)	дуже добре
	C (70-79)	добре
Задовільно	D (60-69)	задовільно
	E (50-59)	достатньо
Незадовільно	FX (35-49)	(незадовільно) з можливістю повторного складання
	F (1-34)	(незадовільно) з обов'язковим повторним курсом

Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне оцінювання (аудиторна та самостійна робота)								Підсумковий тест (залік)	Сума
Змістовий модуль 1			Змістовий модуль 2					40	100
T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8		
7	7	7	7	8	8	8	8		

7. Рекомендована література –основна

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. 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.

Рекомендована література –допоміжна

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.

8. 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>: Учебники, Харків.
3. https://books.google.com.ua/books/about/Modern_Quantum_Chemistry.html?id=KQ3DAgAAQB&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>