

I СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

1. Загальна інформація про навчальну дисципліну	
Повна назва навчальної дисципліни	Квантова хімія
Повна офіційна назва закладу вищої освіти	Сумський державний університет
Повна назва структурного підрозділу	Факультет електроніки та інформаційних технологій, кафедра електроніки, загальної та прикладної фізики
Розробник(и)	Коваленко Ольга Андріївна, інженер I категорії
Рівень вищої освіти	Перший рівень вищої освіти, НРК – 6 рівень, QF-LLL – 6 рівень, FQ-EHEA – перший цикл
Семестр вивчення навчальної дисципліни	8 тижнів протягом 2-го семестру
Обсяг навчальної дисципліни	Обсяг навчальної дисципліни становить 5 кредитів ЄКТС, 150 годин, з яких 32 години становить контактна робота з викладачем (16 годин лекцій, 16 години практичних занять), 118 годин становить самостійна робота
Мова(и) викладання	Українська
2. Місце навчальної дисципліни в освітній програмі	
Статус дисципліни	Вибіркова навчальна дисципліна за освітньою програмою
Передумови для вивчення дисципліни	Необхідні знання з фізики, вищої математики, квантової механіки.
Додаткові умови	Додаткові умови відсутні
Обмеження	Обмеження відсутні
3. Мета навчальної дисципліни	
Метою навчальної дисципліни є ознайомлення з основами квантової механіки, а саме: операторами фізичних величин, рівнянням Шредінгера та способами його розв'язання; основами квантової хімії з її підходами до опису атомних та молекулярних структур і їх властивостей. Студент має набути уявлення про сучасні теоретичні методи, які використовуються у квантовій хімії та набути навичок розрахунку властивостей молекулярних систем із використанням сучасних квантово-хімічних пакетів.	
4. Зміст навчальної дисципліни	

<p>Тема 1. Вступ до квантової хімії. Тема 2. Основи квантової механіки. Тема 3. Основи квантової хімії.</p>	
<p>5. Очікувані результати навчання навчальної дисципліни</p>	
<p>Після успішного вивчення навчальної дисципліни здобувач вищої освіти зможе:</p>	
PH1.	Вміти будувати молекулярні структури у форматах, придатних до використання, як вхідні дані для розрахунків у квантово-хімічних програмних пакетах.
PH2.	Вміти інтерпретувати та оцінювати результати розрахунків у квантово-хімічних програмних пакетах.
PH3.	Застосовувати знання та розуміння особливостей різних квантово-хімічних методів та доцільності їх використання у контексті поставленої задачі.
<p>7. Види навчальних занять та навчальної діяльності</p>	
<p>7.1 Види навчальних занять</p>	
<p>Видами навчальних занять при вивченні дисципліни є лекції (Л) та практичні заняття (ПЗ)</p> <p>Тема 1. Вступ до квантової хімії. Л1. Вступ до квантової хімії, її становлення та розвиток. ПЗ1. Лінійні оператори та їх властивості</p> <p>Тема 2. Основи квантової механіки. Л2. Основні постулати квантової механіки. Хвильова функція, оператори спостережуваних фізичних величин. Рівняння Шредінгера. ПЗ2. Розрахунок міжядерних відстаней, плоских та двограних кутів. Побудова Z-матриць. Л3. Модельні одночастинкові задачі. ПЗ3. Побудови молекулярних структур із використанням спеціалізованого квантово-хімічного ПЗ. Л4. Атом гідрогену. Атомні орбіталі. Спін електрона. ПЗ4. Сучасні напрями розвитку квантової хімії. Л5. Багатоелектронні системи. ПЗ5. Розрахунок оптимальної геометричної структури молекули.</p> <p>Тема 3. Основи квантової хімії. Л6. Метод молекулярних орбіталей. Геометрична будова багатоатомних молекул. ПЗ6. Розрахунок потенціальної енергетичної поверхні обертання. Л7. Напівемпіричні методи у квантовій хімії. ПЗ7. Розрахунок фізико-хімічних характеристик та їх порівняння з даними, отриманими експериментальним шляхом. Л8. Неемпіричні методи у квантовій хімії. ПЗ8. Сучасні квантово-хімічні програмні пакети.</p>	
<p>7.2 Види навчальної діяльності</p>	
<p>НД 1 Підготовка до лекційних занять для участі у лекції дискусії. НД 2 Виконання практичних завдань</p>	
<p>8. Методи викладання, навчання</p>	

<p>МН 1. Лекції-візуалізації із використанням мультимедійних технологій.</p> <p>МН 2. Виконання практичних завдань за варіантами.</p> <p>МН 3. Практичні заняття у вигляді тренінгів з виконанням завдань на персональних комп'ютерах.</p> <p>МН 4. Практичні заняття у вигляді семінарів з мультимедійними презентаціями студентів.</p>	
9. Методи та критерії оцінювання	
9.1. Критерії оцінювання	
<p>а) студент, який протягом навчального періоду виконав всі заплановані види навчальної роботи та за наслідками модульних атестацій набрав необхідну кількість балів, яка відповідає позитивній оцінці (не менше 60 балів), отримує семестрову оцінку у відповідності до набраних рейтингових балів. Складання заходу підсумкового семестрового контролю з метою підвищення позитивної оцінки не здійснюється;</p> <p>б) студент, який протягом поточної роботи набрав кількість рейтингових балів, що не відповідає позитивній оцінці, але не менше 35 балів, зобов'язаний скласти захід підсумкового семестрового контролю (ПСК) після завершення останнього модульно-атестаційного циклу у семестрі або екзаменаційної сесії, якщо вона передбачена, за додатковою відомістю семестрової атестації. Студент має право на два складання ПСК: викладачу та комісії. У разі незадовільного складання ПСК комісії студент отримує оцінку «F» за шкалою ECTS;</p> <p>с) при успішному складанні заходу підсумкового семестрового контролю використовується оцінка «E*», яка засвідчує виконання студентом мінімальних вимог без урахування накопичених балів;</p> <p>д) студент, який за наслідками модульних атестацій набрав менше 35 рейтингових балів, не допускається до ПСК і отримує оцінку «F» за шкалою ECTS.</p>	
9.2 Методи поточного формативного оцінювання	
<p>За дисципліною передбачені такі методи поточного формативного оцінювання: тести для перевірки теоретичних знань; оцінювання виконаних практичних завдань, оцінювання виконаних творчих завдань.</p>	
9.3 Методи підсумкового сумативного оцінювання	
<p>Розподіл рейтингових балів за видами навчальної роботи:</p> <p>а) Робота на аудиторних заняттях:</p> <p>– лекції: 8 лк. × 2 бал/лек. = 16 балів;</p> <p>– практичні заняття: 8 п.з. × 4 бал/п.р. = 32 бали.</p> <p>б) Виконання творчих завдань (2 запланованих завдання) – по 10 балів кожне, загалом до 20 балів;</p> <p>в) Складання комплексного письмового модульного контролю – 32 бали.</p>	
10. Ресурсне забезпечення навчальної дисципліни	
10.1 Засоби навчання	Мультимедійний проектор для проведення Л (МП). Комп'ютери, комп'ютерні системи та мережі.
10.2 Інформаційне та навчально-	1. Masoud Soroush. Computational quantum

методичне забезпечення

- chemistry: insights into polymerization reactions. Elsevier, 2018, 384 p.
2. Manash Protim Borpuzari. Fundamental of quantum chemistry. CreateSpace Independent Publishing Platform, 2017, 160 p.
 3. Frank Jensen. Introduction to Computational Chemistry, 3rd Edition. Wiley, 2017, 660 p.
 4. Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë. Quantum Mechanics, Volume 1: Basic Concepts, Tools, and Applications. Wiley, 2019, 944 p.
 5. Ajit J. Thakkar. Quantum Chemistry: A Concise Introduction. Morgan & Claypool Publishers, 2017, 318 p.