

# Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

(повне найменування закладу вищої освіти)

## Інститут біології, хімії та біоресурсів

(назва інституту/факультету)

Кафедра Кафедра хімічного аналізу, експертизи та безпеки харчової  
продукції  
(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

«Хімія»

(назва програми)

Спеціальність

102 «Хімія»

(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 біології, хімії та біоресурсів

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

Мова навчання

українська

(вказати: на яких мовах читається дисципліна)

Розробники: Борук Сергій Дмитрович, доктор технічних наук, доцент кафедри

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

хімічного аналізу, експертизи та безпеки харчової продукції

Профайл викладача (-ів) <http://ibhb.chnu.edu.ua/profile/user/131>

Контактний тел. +38(066)3003912

E-mail: [s.boruk@chnu.edu.ua](mailto:s.boruk@chnu.edu.ua)

Сторінка курсу в Moodle <https://moodle.chnu.edu.ua/course/view.php?id=1384>

Консультації Очні та он-лайн консультації за попередньою домовленістю



## 5.2. Дидактична карта навчальної дисципліни

Назви змістових модулів 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>Теми лекційних занять</b>	<b>Змістовий модуль 1. Основи квантової механіки молекул</b>											
<i>Тема 1. Основні постулати квантової механіки. Оператори фізичних величин. Рівняння Шредінгера.</i>	20	2	2			16						
<i>Тема 2. Модельні квантово механічні задачі</i>	20	4	4			12						
<i>Тема 3. Квантовий осцилятор</i>	20	4	4			12						
Разом за ЗМ 1	60	10	10			40						
<b>Теми лекційних занять</b>	<b>Змістовий модуль 2. Квантова теорія будови атомів</b>											
<i>Тема 4. Атом водню. Атомні орбіталі</i>	20	2	2			16						
<i>Тема 5. Спін електронної системи. Спінові функції</i>	20	4	4			12						
<i>Тема 6. Хвильова функція багатоелектронної системи</i>	20	4	4			12						
Разом за ЗМ 2	60	10	10			40						
<b>Теми лекційних занять</b>	<b>Змістовий модуль 3. Основні методи квантової хімії</b>											
<i>Тема 7. Молекулярне рівняння Шредінгера. Адіабатичне наближення. Поверхня потенційної енергії.</i>	20	2	2			16						
<i>Тема 8. Опис коливань молекул у гармонічному наближенні. Нормальні коливання. Ефекти ангармонізму</i>	20	4	4			12						
<i>Тема 9. Метод молекулярних орбіталей Хюкеля</i>	20	4	4			12						
Разом за ЗМ 3	60	10	10			40						
<b>Усього годин</b>	180	30	30			120						

### 5.3. Зміст завдань для самостійної роботи

№	Назва теми
1	Теорія Бора та атомні спектри.
2	Будова мезоатомів та їх використання у дослідженнях хімічної будови речовини.
3	Основні постулати квантової механіки. Обчислення комутаторів операторів.
4	Стаціонарне рівняння Шредингера для модельних задач. Обчислення середніх значень оператора координати для модельних задач.
5	Колівальний спектр двохатомних молекул.
6	Обчислення комутаторів операторів кутового моменту та імпульсу.
7	Атомні орбіталі та радіальна функція розподілу.
8	Спінові функції багатоелектронної системи.

\* ІНДЗ – для змістового модуля, або в цілому для навчальної дисципліни за рішенням кафедри (викладача).

### 6. Система контролю та оцінювання

#### Види та форми контролю:

1. Усні відповіді на заняттях.
2. Письмові розрахункові контрольні роботи.
3. Тестування в системі дистанційного навчання Moodle.
4. Домашні самостійні роботи.
5. Форма підсумкового контролю – залік.

#### Засоби оцінювання

1. Усні відповіді на лабораторних заняттях.
2. Захисти лабораторних робіт: власне, оцінка за виконання роботи та оцінка за оформлення протоколу виконання лабораторної роботи та висновків.
3. Тестування в системі дистанційного навчання Moodle.
4. Письмові контрольні роботи. Розв'язування задач.
5. Домашні самостійні роботи: розрахункові, теоретичні, експериментальні.
6. Міні-доповіді за матеріалами виконання лабораторних робіт.

#### Критерії оцінювання результатів навчання з навчальної дисципліни

(Критерієм успішного проходження здобувачем освіти підсумкового оцінювання може бути досягнення ним мінімальних порогових рівнів оцінок за кожним запланованим результатом навчання навчальної дисципліни.

Мінімальний пороговий рівень оцінки варто визначати за допомогою якісних критеріїв і трансформувати його в мінімальну позитивну оцінку використовуваної числової (рейтингової) шкали).

### Розподіл балів, які отримують студенти (залік)

Поточне оцінювання (аудиторна та самостійна робота)									Кількість балів (залік)	Сумарна к-ть балів
Змістовий модуль 1			Змістовий модуль 2			Змістовий модуль 3				
T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	T9	40	100
6	7	7	6	7	7	6	7	7		

## Шкала оцінювання: національна та ЄКТС

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

### 5. Рекомендована література

#### 5.1. Базова (основна)

1. Слета Л.А., Иванов В.В. Квантовая химия. –Харьков: Фолио, 2007. -476 с.
2. Боженко К.В. Основы квантовой химии М.: Российский университет дружбы народов, 2010.- 128 с.
3. Кларк Т. Компьютерная химия. -М.: Мир, 1990.- 381 с.
4. П. Эткинс Физическая химия. т.2. –М.: Мир, 1980. – 584 с.
5. Черановський В.О., Иванова К.Ф. Основи будови речовини. Навчальний посібник для студентів хімічного факультету –Харків: ХНУ, 2003. -121 с.

#### 5.2. Допоміжна

1. Харгитаи И., Харгитаи М. Симметрия глазами химика. -М.: Мир, 1989.- 494 с.
2. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения.. -М.: Мир,1983.- 396 с.
3. Кузьмичев В.Э. Законы и формулы физики. -Киев: Наукова Думка, 1989.- 862 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М Квантовая механика. Часть III. -М.: Наука, 1975. – 767 с.
5. Цюликке Л. Квантовая химия. т.1.-М.: Мир, 1976. -512 с

### 6. Інформаційні ресурси

1. <http://window.edu.ru> – единое окно доступа к образовательным ресурсам.
2. <http://lib.rus.ec> – большая электронная библиотека.
3. <http://e-learning.chnu.edu.ua> – сайт Чернівецького національного університету, дистанційне навчання.