


Одеський національний університет імені І. І. Мечникова  
Факультет хімії та фармації  
Кафедра аналітичної та токсикологічної хімії

Силабус курсу

**КВАНТОВА ХІМІЯ**

Посилання на профіль викладача: <a href="http://chempharm.onu.edu.ua/storage/files/Kaf_analit/Anketi_analit/Anketa_Snigur.pdf">http://chempharm.onu.edu.ua/storage/files/Kaf_analit/Anketi_analit/Anketa_Snigur.pdf</a>	
<b>Обсяг:</b>	3 кредити ЄКТС / 90 годин <i>Очна форма навчання:</i> лекції - 16 год., практичні заняття – 14 годин, самостійна робота здобувача освіти – 60 годин. <i>Заочна форма навчання:</i> лекції - 6 год., практичні заняття – 4 години, самостійна робота здобувача освіти – 80 годин.
<b>Семестр</b>	осінній семестр
<b>Дні, час, місце:</b>	згідно розкладу
<b>Викладач:</b>	 <b>Снігур Денис Васильович</b> кандидат хімічних наук, доцент доцент кафедри аналітичної та токсикологічної хімії
<b>Контактний тел.</b>	(063)194-35-08
<b>Е-mail:</b>	<a href="mailto:snigur@onu.edu.ua">snigur@onu.edu.ua</a>
<b>Робоче місце</b>	Факультет хімії та фармації, вул. Університетська, 14 кафедра аналітичної та токсикологічної хімії, кімн. 303
<b>Консультації</b>	<i>Офлайн:</i> 1 година на тиждень за розкладом <i>Онлайн:</i> середа 14.00-15.00 Telegram, Zoom (за попередньою домовленістю)

**КОМУНІКАЦІЯ**

Спілкування в аудиторії за розкладом. Інші види комунікації: E-mail, соціальні мережі (група Telegram), Zoom.

**е-mail:** [snigur@onu.edu.ua](mailto:snigur@onu.edu.ua)

**телефон:** (063)194-35-08

**соціальні мережі:** Telegram (за номером телефону)

**аудиторія:** за розкладом

**АНОТАЦІЯ КУРСУ**

**Предмет вивчення дисципліни** - основи квантової механіки у застосуванні до розв'язання хімічних задач.

**Пререквізити курсу:** дисципліна відноситься до вибіркових та базується на знаннях та вміннях в області хімії, фізики та математики, отриманих у старшій школі (10-11 класи) при одержанні повної загальної середньої освіти.

**Постреквізити курсу:** опанування курсу сформує уміння і навички, необхідні для виконання міждисциплінарної курсової роботи, а також свідомого проведення науково-дослідної роботи.

**Мета курсу** - сформувати у здобувачів вищої освіти здатність застосовувати базові теорії та моделі сучасної квантової хімії для розрахунків фізико-хімічних властивостей сполук.

**Завдання дисципліни:**

- засвоєння основних понять квантової механіки й математичного апарату квантової хімії при вивченні теорії молекулярного зв'язку;
- опанування квантово-хімічних методів дослідження структури молекул, їх симетрії та методів ідентифікації сполук;
- формування вмінь і навичок щодо розрахунку структури і властивостей молекул речовин;
- опанування сучасних програмних комплексів для квантово-хімічних розрахунків.

**Очікувані результати.**

Здобувач освіти повинен:

**знати:**

- основні поняття, наближення, рівняння і методи квантової хімії;
- взаємозв'язок між будовою та властивостями речовин;
- межі застосування різних методів квантової хімії;
- можливості практичного застосування сучасних методів квантової хімії.

**вміти:**

- застосовувати сучасні квантово-хімічні обчислювальні програми;
- обирати оптимальні квантово-хімічні методи оптимізації геометрії молекул;
- проводити розрахунки електронної будови молекул;
- інтерпретувати результати квантово-хімічних розрахунків та співвідносити їх з будовою молекул.

## ОПИС КУРСУ

**Форми і методи навчання**

Курс викладається на очній та заочній формі навчання і передбачає лекції, практичні заняття та організацію самостійної роботи здобувачів.

Під час викладання дисципліни використовуються наступні методи навчання: *словесні* (лекції, пояснення, обговорення проблемних ситуацій); *наочні* (мультимедійні презентації); *практичні* (практичні роботи, розрахункові завдання, робота з сучасними квантово-хімічними програмними комплексами).

Передбачається проведення очних та онлайн консультацій за розкладом.

**Зміст навчальної дисципліни**

**Змістовий модуль 1. Основи квантової механіки та квантової хімії**

- Тема 1. Вступ до квантової теорії.
- Тема 2. Модельні квантово-механічні задачі.
- Тема 3. Квантово-механічне описання молекули.
- Тема 4. Основи теорії функціоналу густини.

**Змістовий модуль 2. Прикладні аспекти квантової хімії**

- Тема 5. Врахування електронних кореляцій.
- Тема 6. Базисні набори, види та класифікація.
- Тема 7. Напівемпіричні методи та їх практичне застосування.
- Тема 8. Сучасні квантово-хімічні програмні комплекси та його застосування на вирішення практичних хімічних завдань.

### **Рекомендована література**

1. Квантова хімія. Дослідження протонування органічних сполук [Електрон. ресурс] : електрон. метод. вказівки для студ. ф-ту хімії та фармації / уклад. : Д. В. Снігур, О. М. Жуковецька, Р. Є. Хома. Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2023. 22 с. 0,9 МБ. [dspace.onu.edu.ua](https://dspace.onu.edu.ua)
2. Висоцький В. І., Максюта М. В., Ястремський І. О. Збірник задач із квантової механіки : навч. посіб. К. : ВПЦ "Київський університет", 2019. 287 с.
3. The ORCA quantum chemistry program package / F. Neese, F. Wennmohs, U. Becker, C. Riplinger. *J. Chem. Phys.* 2020. Vol. 152, issue 22. DOI: 10.1063/5.0004608.
4. Dral P. O. Quantum Chemistry in the Age of Machine Learning. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2020. Vol. 11, P. 2336–2347. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b03664.
5. Zhukovetska O., Fizer M., Mariychuk R., Guzenko O., Snigur D. Spectrophotometric and DFT study of Germanium(IV) interaction with 6,7-dihydroxy-2,4-diphenyl-1-benzopyran-1-ium bromide in solutions: Room-temperature cloud point extraction and its analytical application. *Journal of Molecular Liquids*. 2024. Vol. 401, art. no. 124724, DOI: 10.1016/j.molliq.2024.124724
6. Fizer M., Fizer O., Barbalat D., Shishkina S., Snigur D. Structural peculiarities of new benzopyrylium dyes: X-ray, FT-IR, and DFT complex study. *Journal of Molecular Structure*. 2022. Vol. 1252, art. no. 132178, DOI: 10.1016/j.molstruc.2021.132178
7. Snigur D., Fizer M., Chebotarev A., Lukianova O., Zhukovetska O. Spectroscopic and computational studies of erythrosine food dye protonation in aqueous solution. *Dyes and Pigments*. 2022. Vol. 198, art. no. 110028, DOI: 10.1016/j.dyepig.2021.110028
8. Snigur D., Fizer M., Chebotarev A., Lukianova O., Bevziuk K. Protonation of quinoline yellow WS in aqueous solutions: Spectroscopic and DFT theoretical studies. *Journal of Molecular Liquids*. 2021. Vol. 327, art. no. 114881, DOI: 10.1016/j.molliq.2020.114881
9. Snigur D., Barbalat D., Fizer M., Chebotarev A., Shishkina S. Synthesis and properties of 6,7-dihydroxybenzopyrylium perchlorate halogen derivatives: X-ray, spectroscopic and theoretical studies. *Tetrahedron*. 2020. Vol. 76 (42), art. no. 131514, DOI: 10.1016/j.tet.2020.131514
10. Bevziuk K., Chebotarev A., Fizer M., Klochkova A., Pliuta K., Snigur D. Protonation of Patented Blue V in aqueous solutions: theoretical and experimental studies. *Journal of Chemical Sciences*. 2018. Vol. 130 (2), art. no. 12, DOI: 10.1007/s12039-017-1411-2

### **ОЦІНЮВАННЯ**

Загальна максимальна кількість балів – 100, в тому числі:

- усне опитування на практичних заняттях – 24 бали очна форма / 16 балів заочна форма;
- тестування за змістовими модулями – 60 балів;
- доповідь-презентація – 16 балів;
- самостійна робота (письмові відповіді на контрольні питання за темами 1-8) для заочної форми - 8 балів.

Підсумковий контроль – залік.

Загальна підсумкова оцінка визначається як сума балів за результатами поточного і періодичного контролю.

Нарахування бонусних балів не передбачається.

Критерії оцінки й термін здачі завдань чітко визначені (згідно з графіком навчального процесу) і заздалегідь оголошуються здобувачам освіти.

### **Самостійна робота здобувачів**

Робота здобувачів вищої освіти складається з самостійного вивчення з певного переліку тем або тем, що потребують поглибленого вивчення. Питання з тем, що відведені на самостійне вивчення включені до контрольних заходів. Самостійна робота контролюється обов'язковими розрахунковими завданнями та підготовкою доповіді-презентації. Увесь обсяг самостійної роботи містить завдання, які вимагають від здобувача систематичну самостійну роботу.

Здобувачеві вищої освіти надається можливість пройти професійні курси/тренінги, професійне стажування, онлайн-курси, громадянську освіту, отримати відповідний сертифікат на освітніх платформах, що може бути зараховано як періодичний, поточний та фрагмент підсумкового контролю.

### **ПОЛІТИКА КУРСУ**

Готуючись до лекцій та практичних занять, здобувач вищої освіти має опрацювати попередній лекційний матеріал, рекомендовану навчальну і наукову літературу. Перелік завдань надається викладачем та є доступним на платформі Moodle <https://moodle.onu.edu.ua/>. У разі відсутності на контрольному заході, його можна перескласти у час планової консультації. Перелік питань до поточного і періодичного контролю міститься у робочій програмі дисципліни, яка розміщена на сайті факультету хімії та фармації та на платформі Moodle. Складання і перескладання заліку здійснюється відповідно до Положення про організацію і проведення контролю результатів навчання здобувачів вищої освіти Одеського національного університету імені І.І. Мечникова [http://onu.edu.ua/pub/bank/userfiles/files/documents/polozennya/poloz-org-kontrol\\_2022.pdf](http://onu.edu.ua/pub/bank/userfiles/files/documents/polozennya/poloz-org-kontrol_2022.pdf).

**Політика щодо академічної доброчесності:** регламентується Положенням про запобігання та виявлення академічного плагіату у освітній та науково-дослідній роботі учасників освітнього процесу та науковців Одеського національного університету імені І. І. Мечникова [http://onu.edu.ua/pub/bank/userfiles/files/acad\\_council/polozhennya-antiplagiat-2021.pdf](http://onu.edu.ua/pub/bank/userfiles/files/acad_council/polozhennya-antiplagiat-2021.pdf)

Здобувач вищої освіти та лектор повинні дотримуватися академічної доброчесності згідно Кодексу академічної доброчесності учасників освітнього процесу Одеського національного університету імені І.І. Мечникова <http://onu.edu.ua/pub/bank/userfiles/files/documents/acad-dobrochesnost.pdf>

За порушення академічної доброчесності здобувачі освіти можуть бути притягнені до такої академічної відповідальності:

- зниження результатів оцінювання самостійних завдань, тестувань за змістовими модулями;

- призначення додаткових контрольних заходів (додаткові індивідуальні завдання, тестування за змістовими модулями);
- повторне проходження відповідного освітнього компоненту освітньої програми.

**Політика щодо відвідування та запізнень:** відвідування практичних занять є обов'язковим, лекцій – бажаним, запізнень потрібно уникати. Бали за відвідування занять не нараховуються.

**Мобільні пристрої:** допускається використання смартфона, планшету або іншого пристрою з доступом до інтернет-мережі під час лекції або практичного заняття у випадках роботи з інформаційними джерелами та їх обговоренням (визначається лектором).

**Поведінка в аудиторії:** ділова та одночасно творча атмосфера на лекціях та практичних заняттях, під час контрольних заходів – зосереджена, без розмов та відволікань.