ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

БІОЛОГІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

ЗАТВЕРДЖУЮ
Декан біологічного факультету
_____ Л.О.Смельянчик
(підпис) (ініціали та прізвище)
«___» _____ 2026 р.

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
КВАНТОВА ХІМІЯ

(назва навчальної дисципліни)

підготовки бакалавра

(назва освітнього ступеня)

денної форми здобуття освіти

освітньо-професійна програма Хімія

(назва)

спеціальності 102 Хімія

(шифр, назва спеціальності)

галузі знань 10 Природничі науки

(шифр і назва)

Викладач: Генчева Вікторія Іванівна, к.б.н., доцент кафедри хімії, Перетятько Вікторія Віталіївна, к.пед.н., доцент кафедри хімії.

Обговорено та ухвалено
на засіданні кафедри хімії

Протокол № 1 від "26" 08 2026 р.
в.о. завідувача кафедри хімії

_____ В.І. Генчева
(підпис) (ініціали, прізвище)

Погоджено
Гарант освітньо-професійної програми

_____ М.М. Корнет
(підпис) (ініціали, прізвище)

2026

Запорізький національний університет
Силабус навчальної дисципліни
Квантова хімія

Зв`язок з викладачем (викладачами): Генчева Вікторія Іванівна
E-mail: *genchevaviktoriya1@gmail.com*
Сезн ЗНУ повідомлення: *https://moodle.znu.edu.ua/course/view.php?id=2120*
Телефон: *(095) 336-71-27*
Інші засоби зв'язку: *Viber, Telegram*
Кафедра: *хімії, III корпус, ауд. 303*

Зв`язок з викладачем: Перетятько Вікторія Віталіївна
E-mail: *viktoriyaperetyatko@np.znu.edu.ua*
СЕЗН ЗНУ повідомлення: *https://moodle.znu.edu.ua/course/view.php?id=2120*
Телефон: *(097) 528 07-80*
Інші засоби зв'язку: *Viber, Telegram*
Кафедра: хімії, *III корпус, ауд. 303*

1. Опис навчальної дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни «Квантова хімія» є формування у студентів біологічного факультету системи практичних умінь з використанням основних методів квантової хімії, розвиток у них умінь і навичок проводити прості квантово-механічні розрахунки, що є фундаментом для подальшого вивчення квантових явищ у фізичній хімії, фізико-хімічних методах дослідження складу речовин. Знання, набуті під час вивчення курсу, є потрібними для подальшої професійної діяльності фахівця-хіміка.

Основними завданнями дисципліни «Квантова хімія» є засвоєння та вміння використовувати теоретичні навички для самостійного вирішення науково-дослідних та практичних задач, основних понять квантової механіки, математичного апарату квантової хімії, вивчення теорії молекулярного зв'язку, основних положень методу молекулярних орбіталей, який необхідний для подальшого вивчення і розуміння методів дослідження структури молекул, їх симетрії та методів ідентифікації сполук, більш ефективному вивченню теоретичних питань та набуттю професійних якостей при прогнозуванні новітніх технологій.

Міждисциплінарні зв'язки: «Квантова хімія» базується на вивченні неорганічної хімії, органічної хімії, фізичної хімії. У структурно-логічній схемі освітньої програми «Хімія» першого (бакаврського) рівня вищої освіти навчальна дисципліна «Квантова хімія» пов'язана з освітніми компонентами Фізична хімія, Фізична хімія біополімерів.

Пререквізити. Вивчення дисципліни «Квантова хімія» безпосередньо опирається на основи знань неорганічної хімії, органічної хімії, фізичної хімії.

Постреквізити. Знання теоретичних основ квантової хімії необхідні для глибшого вивчення фізичної хімії біополімерів.

Паспорт навчальної дисципліни

Нормативні показники	денна форма здобуття освіти
Статус дисципліни	**Обов'язкова**
Семестр	5-й
Кількість кредитів ECTS	4
Кількість годин	120
Лекційні заняття	16 год.
Лабораторні заняття	32 год.
Самостійна робота	72 год.
Консультації	Поточні консультації проводяться у понеділок з 14.30 до 15.30 на платформі Google Meet (https://meet.google.com/mna-padq-omt);

	Viber за попередньою домовленістю за телефоном: (095) 336-71-27 (у робочий час)
Вид підсумкового семестрового контролю:	**екзамен**
Посилання на електронний курс у СЕЗН ЗНУ (платформа Moodle)	https://moodle.znu.edu.ua/course/view.php?id=1087

2. Методи досягнення запланованих освітньою програмою компетентностей і результатів навчання

Компетентності / результати навчання	Методи навчання	Форми і методи оцінювання
ЗК 1 Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.	Лекція, розповідь, пояснення, демонстрація, пояснювальна бесіда, евристична бесіда, лабораторні роботи, досліди.	Розв'язання ситуаційних задач; тестування; виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.
ЗК 2 Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.	Лекція, розповідь, пояснення, демонстрація, пояснювальна бесіда, евристична бесіда, лабораторні роботи, досліди.	Розв'язання ситуаційних задач; тестування; виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.
ЗК 6 Здатність спілкуватися іноземною мовою.	Інтелектуальні ігри, лабораторні роботи, ситуація-модель.	Виконання завдань лабораторних робіт; розв'язання ситуаційних задач
ЗК 10 Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.	Пояснювальна бесіда лекція, дискусія, інформаційне повідомлення, катехічна бесіда, формалізація.	Тестування; виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.
ЗК 11 .Здатність бути критичним і самокритичним.	Моделювання, досліди, самостійне спостереження	Виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.
СК 1 .Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.	Лекція, розповідь, пояснення, демонстрація, пояснювальна бесіда, евристична бесіда, лабораторні роботи,	Виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.

	досліди.	
СК 10 Здатність до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання.	Лабораторні роботи, досліди	Розв'язання ситуаційних задач; тестування; виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.
Р 1 Розуміти ключові хімічні поняття, основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, а також хімічних технологій на рівні, достатньому для їх застосування у професійній діяльності та для забезпечення можливості в подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії.	Лекція, розповідь, пояснення, демонстрація, пояснювальна бесіда, евристична бесіда, лабораторні роботи, досліди.	Розв'язання ситуаційних задач; тестування; виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.
Р 3 Описувати хімічні дані у символьному вигляді.	Лекція, розповідь, пояснення, демонстрація, лабораторні роботи	Розв'язання ситуаційних задач; тестування; виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.
Р 4 Розуміти основні закономірності та типи хімічних реакцій та їх характеристики.	Лекція, розповідь, пояснення, демонстрація, пояснювальна бесіда, евристична бесіда, лабораторні роботи, досліди.	Розв'язання ситуаційних задач; тестування; виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.
Р 5 Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.	Моделювання, досліди, демонстрація, пояснення, аналіз і синтез.	Виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.
Р 7 Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку	Досліди, демонстрація, пояснення, аналіз.	Виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.
Р 17 Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову	Інтелектуальні ігри, лабораторні роботи, ситуація-модель.	Виконання завдань лабораторних робіт; розв'язання ситуаційних

доброчесність.		задач
Р 18 Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.	Моделювання, лекція, дискусія, інформаційне повідомлення, катехічна бесіда, формалізація.	Тестування; виконання завдань лабораторних робіт; виконання індивідуального дослідницького завдання.

3. Зміст навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1.Основи квантової механіки

Тема 1. Вступ до квантової теорії. Корпускулярно-хвильовий дуалізм.

Електромагнітне випромінювання. Гіпотеза Планка. Фотоефект внутрішній, зовнішній. Ефект Комптона. Гіпотеза де Бройля. Хвильова механіка Шредінгера, принцип невизначенності Гейзенберга. Основні принципи квантової механіки.

Тема 2. Основні постулати квантової механіки.

Постулат 1.Хвильовафункція, її інтерпретація та властивості хвильової функції. Імовірна інтерпретація хвильової функції. Умови нормування. Густин ймовірності розподілу частинок у просторі, електронна густина. Постулат 2. Оператори спостережуваних фізичних величин. Оператори координати, імпульсу, кутового моменту і його компонент, кінетичної та потенційної енергії. Оператор Гамільтона. Постулат 3. Рівняння Шредінгера. Нестаціонарне рівняння Шредінгера. Стаціонарний стан і його властивості. Стаціонар не рівняння Шредінгера. Постулат 4. Принцип суперпозиції. Імовірність результатів вимірювання фізичних величин, їх середнє значення. Закони збереження у квантовій механіці.

Тема 3.Модельні квантово-механічні задачі.

Вільний рух частинки, частинка в одновимірному потенційному ящику. Рівняння Шредінгера для частинки в потенційному ящику. Інтерпретація квантового числа. Частинка в тривимірному потенційному ящику, модуль вільного електрона для спряжених систем. Потенційні бар'єри і тунельний ефект. Приклади тунелювання.

Тема 4. Квантовий осцилятор.

Рух у центральному полі сил. Гармонічний осцилятор. Рух частинки в кулонівському полі сил. Квантовий осцилятор. Хвильові функції квантового осцилятора. Поліноми Ерміта і хвильових функцій квантового осцилятора. Вузлові точки хвильових функцій гармонічного осцилятора. Енергетичні рівні гармонічного осцилятора та їх еквідистантність.

Тема 5. Квантування кутового моменту.

Рівні енергії у планетарній моделі атома. Стійкість системи в атомних масштабах згідно принципу невизначеності Гейзенберга. Принцип відповідності. Кутовий момент в моделі атома водню за Бором. Три постулати Бора. Приведена маса. Зв'язок між енергією та моментом обертання. Квантування моменту обертання.

Змістовий модуль 2.Основні методи квантової хімії.

Тема 1. Молекулярне рівняння Шредінгера.

Адіабатичнена ближення. Поверхня потенційної енергії. Електронна будова молекулярних систем. Стаціонарне рівняння Шредінгера для ізольованої молекули. Розв'язок рівняння Шредінгера. Наближення Борна Оппенгеймера (адіабатичне наближення). Потенціальні криві та поверхні потенційної енергії. Їх загальна структура. Принцип тотожності частинок у квантовій механіці. Класифікація атомних орбіталей та атомні терми. Теорія молекули гелію.

Тема 2.Описколивань молекул у гармонічному наближенні.

Обертальний стан молекул. Типи молекулярних товчків. Коливальний стан молекул. Квантово-механічний розв'язок рівняння Шредінгера при коливанні молекул. Правило відбору. Потенціал Морзе. Коливально-обертальні спектри. Комбінаційне розсіювання спектру. Специфічні правила відбору для спектрів комбінаційного розсіювання. Коливання валентні, коливання деформаційні, вироджені, симетричні валентні, антисиметричні валентні. Характеристичні коливання.

Тема 3. Молекулярний іон водню.

Утворення молекулярного іона водню. Тип зв'язку в молекулярному іонаводню. Розрахунок залежності повної енергії та її компонент. Склад молекулярного іонаводню. Допущення Борна-Оппенгеймера і оператор Гамільтона для повної енергії системи. Будова хвильової функції для електронів за методом МО ЛКАО. Інтеграл перекриття. Резонансний інтеграл, обмінний інтеграл,

кулонівський інтеграл. Потенційні криві молекули H2+. Енергетична діаграма іонуводню. Одиниці енергії та довжини.

Тема 4.Метод молекулярних орбіталей Хюккеля.

Основні наближення і обчислювальна схема методу молекулярних орбіталей Хюккеля. π-електронне наближення. Кулонівський і резонансний інтеграли. Нехтування інтегралом перекриття. Рівняння для знаходження орбітальних коефіцієнтів. Хюккелівський детермінант. Енергетичні діаграми. Приклади хюккелівських розрахунків. Молекулярні діаграми для спряжених систем. Електронна структура вуглеводнів. Теорія реакційної здатності органічних сполук.

Тема 5.Симетріямолекулярнихорбіталей.

Визначення груп симетрії. Елементи та операції симетрії. Точкові групи симетрії молекул (номенклатура Шенфліса, класифікація). Генератори точкових груп. Скінчені та неперервні точкові групи. Побудова симетризованих МО ЛКАО. Збереження орбітальної симетрії в хімічних реакціях. Симетрія реагентів і продуктів реакції. Кореляційні діаграми. Роль кореляційних діаграм у теорії узгоджених реакцій. Основні дії при їх побудові. Правила Вудворда-Хоффмана. Правила відбору.

Тема 6. Простий метод. Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул.

Резонансні структури. Правила побудови резонансних структур. Інтерпретація хімічного зв'язку в рамках методу валентних схеми. Порівняння методів молекулярних орбіталей та валентних схем. Концепція резонансу. Резонансні (канонічні структури). Енергія резонансу. Кількісні характеристики молекул. Заряди на атомах, порядки зв'язків, індекси вільної валентності та дипольні моменти. Розрахунок енергії зв'язку в молекулі водню.

4. Структура навчальної дисципліни

Вид заняття /роботи	Назва теми	Кількість годин	Згідно з розкладом
		о/д.ф.	
Лекція 1	Тема. *Вступ до квантової теорії.*	1	*1 раз на тиждень*
Лабораторне заняття 1	Тема. *Вступ до квантової теорії. Корпускулярно-хвильовий дуалізм. Теорія Бора та атомні спектри.* Перелік завдань: 1. Правила техніки при роботі в хімічній лабораторії при виконанні лабораторного практикуму 2. Проведення лабораторного практикуму	2	*1 раз на тиждень*
Самостійна робота	Тема 1. *Вступ до квантової теорії.* Питання для розгляду: 1. Електромагнітне випромінювання. 2. Гіпотеза Планка. 3. Фотоефект внутрішній, зовнішній. 4. Ефект Комптона. 5. Гіпотеза де Бройля. 6. Хвильова механіка Шредінгера, принцип невизначеності Гейзенберга. 7. Основні принципи квантової механіки.	6	*1 раз на тиждень*
Лекція 2	Тема. *Основні постулати квантової механіки.*	2	*1 раз на тиждень*
Лабораторне заняття 2	Тема. *Основні постулати квантової механіки. Оператори в квантовій механиці* Перелік завдань: Проведення лабораторного практикуму	2	*1 раз на тиждень*
Самостійна робота	Тема 2.*Основні постулати квантової механіки.* Питання для розгляду: 1. Постулат 1. Хвильова функція. 2. Постулат 2. Оператори спостережуваних фізичних величин. 3. Постулат 3. Рівняння Шредінгера. 4. Постулат 4. Принцип суперпозиції.	6	*1 раз на тиждень*
Лекція 3	Тема. *Модельні квантово-механічнізадачі.*	1	*1 раз на тиждень*
Лабораторне заняття 3	Тема. *Модельні квантово-механічні задачі. Стаціонарне рівняння Шредінгера для модельних задач. Обчислення середніх значень оператора. Координати для модельних задач.* Перелік завдань: Проведення лабораторного практикуму.	4	*1 раз на тиждень*
Самостійна робота	Тема 3. *Модельні квантово-механічні задачі* Питання для розгляду: 1. Вільний рух частинки, частинка в одновимірному потенційному ящику. 2. Рівняння Шредінгера для частинки в потенційному ящику. 3. Інтерпретація квантового числа. 4. Частинка в тривимірному потенційному ящику, модуль вільного електрона для спряжених систем. 5. Потенційні бар'єри і тунельний ефект.	6	*1 раз на тиждень*
Лекція 4	Тема. *Квантовий осцилятор*	1	*1 раз на тиждень*
Лабораторне заняття 4	Тема. *Квантовий осцилятор. Лінійний гармонічний осцилятор* Перелік завдань: Проведення лабораторного практикуму.	2	*1 раз на тиждень*

Самостійна робота	Тема 4. *Квантовий осцилятор.* Питання для розгляду: 1. Рух у центральному полі сил. 2. Гармонічний осцилятор. 3. Рух частинки в кулонівському полі сил. 4. Квантовий осцилятор. 5. Хвильові функції квантового осцилятора. 6. Поліноми Ерміта і хвильових функцій квантового осцилятора. 7. Вузлові точки хвильових функцій гармонічного осцилятора. 8. Енергетичні рівні гармонічного осцилятора та їх еквідистантність.	6	*1 раз на тиждень*
Лекція 5	Тема. *Квантування кутового моменту*	2	*1 раз на тиждень*
Лабораторне заняття 5	Тема. *Квантування кутового моменту. Коливальний спектр двуатомної молекули* Перелік завдань: Проведення лабораторного практикуму.	2	*1 раз на тиждень*
Самостійна робота	Тема 5. *Квантування кутового моменту* Питання для розгляду: 1. Рівні енергії у планетарній моделі атома. 2. Стійкість системи в атомних масштабах згідно принципу невизначеності Гейзенберга. 3. Принцип відповідності. 4. Кутовий момент в моделі атома водню за Бором. 5. Три постулати Бора. 6. Приведена маса. 7. Зв'язок між енергією та моментом обертання. 8. Квантування моменту обертання.	6	*1 раз на тиждень*
Лекція 6	Тема. *Молекулярне рівняння Шредінгера. Адіабатичне наближення. Поверхня потенційної енергії*	2	*1 раз на тиждень*
Лабораторне заняття 6	Тема. *Молекулярне рівняння Шредінгера. Адіабатичне наближення. Поверхня потенційної енергії. Енергетична діаграма молекулярних орбіталей.* Перелік завдань: Проведення лабораторного практикуму.	2	*1 раз на тиждень*
Самостійна робота	Тема 6. *Молекулярне рівняння Шредінгера.* Питання для розгляду: 1. Адіабатичне наближення. 2. Поверхня потенційної енергії. 3. Електронна будова молекулярних систем. 4. Стаціонарне рівняння Шредінгера для ізольованої молекули. 5. Розв'язок рівняння Шредінгера. 6. Наближення Борна Оппенгеймера (адіабатичне наближення). 7. Потенціальні криві та поверхні потенційної енергії. 8. Їх загальна структура. 9. Принцип тотожності частинок у квантовій механіці. 10. Класифікація атомних орбіталей та атомні терми. 11. Теорія молекули гелію.	6	*1 раз на тиждень*
Лекція 7	Тема. *Використання кристалохімічних даних для вивчення складу кристалів.* *Опис коливань молекул у гармонічному наближенні*	1	*1 раз на тиждень*
Лабораторне заняття 7	Тема. *Опис коливань молекул у гармонічному наближенні. Симетрія молекулярних орбіталей.* Перелік завдань: Проведення лабораторного практикуму.	4	*1 раз на тиждень*

Самостійна робота	Тема 7. *Опис коливань молекул у гармонічному наближенні.* Питання для розгляду: 1. Обертальний стан молекул. 2. Типи молекулярних вовчків. 3. Коливальний стан молекул. Квантово-механічний розв'язок рівняння Шредінгера при коливанні молекул. 4. Правило відбору. 5. Потенціал Морзе. 6. Коливально-обертальні спектри. 7. Комбінаційне розсіювання спектру. 8. Специфічні правила відбору для спектрів комбінаційного розсіювання. 9. Коливання валентні, коливання деформаційні, вироджені, симетричні валентні, антисиметричні валентні. 10. Характеристичні коливання.	8	*1 раз на тиждень*
Лекція 8	Тема. *Молекулярний іон водню.*	1	*1 раз на тиждень*
Лабораторне заняття 8	Тема. *Молекулярний іон водню. Молекулярний іон водню* Перелік завдань: Проведення лабораторного практикуму.	2	*1 раз на тиждень*
Самостійна робота	Тема 8. *Молекулярний іон водню* Питання для розгляду: 1. Утворення молекулярного іона водню. 2. Тип зв'язку в молекулярному іоні водню. 3. Розрахунок залежності повної енергії та її компонент. 4. Склад молекулярного іона водню. 5. Допущення Борна-Оппенгеймера і оператор Гамільтона для повної енергії системи. 6. Будова хвильової функції для електронів за методом МО ЛКАО. 7. Інтеграл перекриття. 8. Резонансний інтеграл, обмінний інтеграл, кулонівський інтеграл. 9. Потенційні криві молекули H2+. 10. Енергетична діаграма іону водню. 11. Одиниці енергії та довжини.	8	*1 раз на тиждень*
Лекція 9	Тема. *Метод молекулярних орбіта лей Хюкеля.*	1	*1 раз на тиждень*
Лабораторне заняття 9	Тема. *Метод молекулярних орбіта лей Хюкеля. Використання молекулярної симетрії у розрахунку методом Хюкеля* Перелік завдань: Проведення лабораторного практикуму.	4	*1 раз на тиждень*
Самостійна робота	Тема 9. *Метод молекулярних орбіталей Хюккеля* Питання для розгляду: 1. Основні наближення і обчислювальна схема методу молекулярних орбіталей. 2. Кулонівський і резонансний інтеграли. 3. Нехтування інтегралом перекриття. 4. Рівняння для знаходження орбітальних коефіцієнтів. Хюккелівський детермінант. 5. Енергетичні діаграми. 6. Приклади хюккелівських розрахунків. 7. Молекулярні діаграми для спряжених систем. 8. Електронна структура вуглеводнів. 9. Теорія реакційної здатності органічних сполук.	8	*1 раз на тиждень*

Лекція 10	Тема. *Симетрія молекулярних орбіталей.*	1	*1 раз на тиждень*
Лабораторне заняття 10	Тема. *Симетрія молекулярних орбіталей. Опис коливань молекул у гармонічному наближені* Перелік завдань: Проведення лабораторного практикуму.	2	*1 раз на тиждень*
Самостійна робота	Тема 10. *Симетріямолекулярнихорбіталей* Питання для розгляду: 1. Визначення груп симетрії. 2. Елементи та операції симетрії. 3. Точкові групи симетрії молекул (номенклатура Шенфліса, класифікація). 4. Генератори точкових груп. 5. Скінчені та неперервні точкові групи. 6. Побудова симетризованих МО ЛКАО. 7. Збереження орбітальної симетрії в хімічних реакціях. 8. Симетрія реагентів і продуктів реакції. Кореляційні діаграми. 9. Роль кореляційних діаграм у теорії узгоджених реакцій. 10. Основні дії при їх побудові. 11. Правила Вудворда-Хоффмана. 12. Правила відбору.	8	*1 раз на тиждень*
Лекція 11	Тема. *Простий метод. Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул*	2	*1 раз на тиждень*
Лабораторне заняття 11	Тема. *Простий метод. Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул. Спін основного стану альтернативних молекул з спряженими зв`язками* Перелік завдань: Проведення лабораторного практикуму.	4	*1 раз на тиждень*
Самостійна робота	Тема 11. *Простий метод. Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул.* Питання для розгляду: 1. Резонансні структури. 2. Правила побудови резонансних структур. 3. Інтерпретація хімічного зв'язку в рамках методу валентних схеми. 4. Порівняння методів молекулярних орбіталей та валентних схем. 5. Концепція резонансу. 6. Резонансні (канонічні структури). 7. Енергія резонансу. 8. Кількісні характеристики молекул. 9. Заряди на атомах, порядки зв'язків, індекси вільної валентності та дипольні моменти. 10. Розрахунок енергії зв'язку в молекулі водню.	8	*1 раз на тиждень*

5. Види і зміст контрольних заходів

Вид заняття/роботи	Вид поточного контрольного заходу	Зміст контрольного заходу*	Критерії оцінювання та термін виконання*	Усього балів
1	2	3	4	5
Поточний контроль				
Лабораторні заняття	Лабораторні роботи №№1-7	Виконання лабораторних робіт та оформлення їх протоколу	Виконання кожної з лабораторних робіт поточної атестації №1 та оформлення їх протоколів максимально оцінюється в **2 бали**. **2 бали** – лабораторна робота виконана вчасно та в повному обсязі, та оформлена правильно й якісно. Здобувач освіти повно та вірно здатен проаналізувати та узагальнити отриманий результат. При виконанні лабораторної роботи було дотримано всіх вимог, передбачених програмою курсу. **1,5 бали** – лабораторна робота виконана вчасно, але не в повному обсязі (на 50-74%), при виконанні лабораторної роботи здобувач освіти виконує роботу за зразком з помилками; робить висновки, але не розуміє достатньою мірою мету роботи. **1 бал** – лабораторна робота виконана вчасно, але не в повному обсязі (на 26-49%), при виконанні лабораторної роботи здобувач освіти виконує роботу за зразком з помилками; робить висновки, але не розуміє достатньою мірою мету роботи. **0 балів** – робота виконана невчасно та менш, ніж на 25%, оформлена неохайно, висновки невірно сформульовані. Робота повинна бути представлена на оцінювання впродовж поточної атестації №1.	**14**
Поточні контрольні роботи (тестування)	Тестування 1	Питання для підготовки	**12 балів** за кожну поточну контрольну роботу поточної атестації №1. Кожна контрольна робота містить 12 тестових питань (по 1 балу за одну відповідь). **1 бал** виставляється студенту за правильну відповідь; **0 балів** виставляється студенту за допущену помилку. Тести виконуються он-лайн на платформі в Moodle. https://moodle.znu.edu.ua/course/view.php?id=1123 Тестування повинно бути пройдено впродовж поточної атестації №1.	**12**
Самостійна робота	Питання для підготовки	Підготовка презентації та доповідь за нею, вирішення індивідуальних завдань тощо	Максимальна кіл-ть балів – 4. Підготовка презентації та доповідь за нею, вирішення індивідуальних завдань тощо. При цьому оцінюється глибина розуміння обраної теми доповіді, логічність та послідовність викладення матеріалу (4 балів), відповіді на питання (4 бали).	**4**

Лабораторні заняття	Лабораторні роботи №№8-14	Виконання лабораторних робіт та оформлення їх протоколу	Виконання кожної з лабораторних робіт поточної атестації №1 та оформлення їх протоколів максимально оцінюється в **2бали**. **2 бали** – лабораторна робота виконана вчасно та в повному обсязі, та оформлена правильно й якісно. Здобувач освіти повно та вірно здатен проаналізувати та узагальнити отриманий результат. При виконанні лабораторної роботи було дотримано всіх вимог, передбачених програмою курсу. **1,5 бали** – лабораторна робота виконана вчасно, але не в повному обсязі (на 50-74%), при виконанні лабораторної роботи здобувач освіти виконує роботу за зразком з помилками; робить висновки, але не розуміє достатньою мірою мету роботи. **1 бал** – лабораторна робота виконана вчасно, але не в повному обсязі (на 26-49%), при виконанні лабораторної роботи здобувач освіти виконує роботу за зразком з помилками; робить висновки, але не розуміє достатньою мірою мету роботи. **0 балів** – робота виконана невчасно та менш, ніж на 25%, оформлена неохайно, висновки невірно сформульовані. Робота повинна бути представлена на оцінювання впродовж поточної атестації №1.	**14**
Самостійна робота	Питання для підготовки	Підготовка презентації та доповідь за нею, вирішення індивідуальних завдань тощо	Максимальна кіл-ть балів – 4. Підготовка презентації та доповідь за нею, вирішення індивідуальних завдань тощо. При цьому оцінюється глибина розуміння обраної теми доповіді, логічність та послідовність викладення матеріалу (4 балів), відповіді на питання (4 бали).	**4**
Поточні контрольні роботи (тестування)	Тестування 2	Питання для підготовки	**12 балів** за кожну поточну контрольну роботу поточної атестації №1. Кожна контрольна робота містить 12 тестових питань (по 1 балу за одну відповідь). **1 бал** виставляється студенту за правильну відповідь; **0 балів** виставляється студенту за допущену помилку. Тести виконуються он-лайн на платформі в Moodle. https://moodle.znu.edu.ua/course/view.php?id=1123 Тестування повинно бути пройдено впродовж поточної атестації №2.	**12**
Усього поточний контроль				**60**
Підсумковий контроль				
Екзамен	Питання для підготовки	Екзаменаційний білет, що складається з двох питань та 5 тестів	Кожне питання по 10балів. 5 тестових завдань – кожна правильна відповідь – 1 бал. **1 бал** виставляється студенту за правильні відповіді; **0 балів** виставляється студенту за допущені помилки.	**25**

	Виконання індивідуального дослідницького завдання	Індивідуальна завдання оформлюється у вигляді презентації або на стандартних аркушах паперу формату А4. Times New Roman, 14 pt, 1,5 інтервал, поля стандартні. Обсяг відповіді на 1 питання – 5-7 сторінок або 7-10 слайдів.	Захист індивідуального практичного завдання (15балів) здійснюється на заліковому тижні. Публічний захист є обов'язковою вимогою для зарахування результатів заданими видами робіт. *Результати* виконання студентом індивідуального практичного завдання оцінюється за наступною *шкалою*: Вступ ***(1 бал):*** формулювання необхідності зазначених знань для професійного становлення майбутнього хіміка. Основна частина ***(8балів):*** повнота розкриття питання *(1-2бали)*; опрацювання сучасних наукових інформаційних джерел *(1-2бали)*; цілісність, систематичність, логічна послідовність викладу *(1-4бали).* Висновки ***(1 бал)***: уміння формулювати власне відношення до проблеми, робити аргументовані висновки. Акуратність оформлення письмової роботи ***(1бал)***. Підготовка комп'ютерної презентації***(4 бали)***. уміння користуватися Інтернет ресурсом (1 бал);підбір і логічне розміщення графічних і фотозображень (1 бал); слайд-шоу (близько 7-10 слайдів) (1-2бали). Загальна оцінка визначається як сума балів, отриманих студентом по кожному пункту. Виконання індивідуального завдання оцінюється у ***15балів***.	**15**
Усього підсумковий контроль				**40**

Шкала оцінювання ЗНУ: національна та ECTS

За шкалою ECTS	За шкалою університету	За національною шкалою
		Залік
A	90 – 100 (відмінно)	Зараховано
B	85 – 89 (дуже добре)	
C	75 – 84 (добре)	
D	70 – 74 (задовільно)	
E	60 – 69 (достатньо)	
FX	35 – 59 (незадовільно – з можливістю повторного складання)	Не зараховано
F	1 – 34 (незадовільно – з обов'язковим повторним курсом)	

Відмінно (90 – 100 балів) виставляється, якщо здобувач у повному обсязі володіє навчальним матеріалом, вільно, самостійно та аргументовано викладає його під час усних виступів та надання письмових відповідей; глибоко та всебічно розкриває зміст теоретичних питань, використовуючи при цьому обов'язкову та додаткову літературу; демонструє високий рівень застосування отриманих умінь і навичок, а також оригінальний підхід під час виконання лабораторних завдань.

Добре (75 – 89 балів) виставляється, якщо здобувач достатньо повно володіє навчальним

матеріалом, обґрунтовано його викладає під час усних виступів та надання письмових відповідей; в основному розкриває зміст теоретичних питань, використовуючи при цьому обов'язкову літературу; демонструє високий рівень застосування отриманих умінь і навичок під час виконання лабораторних завдань. Проте, при викладенні деяких теоретичних питань та вирішення лабораторних завдань йому не вистачає достатньої глибини та аргументації, може припускатися окремих несуттєвих неточностей та незначних помилок.

Задовільно (60 – 74 бали) виставляється, якщо здобувач в цілому володіє навчальним матеріалом, викладає його основний зміст під час усних виступів та надання письмових відповідей, але без глибокого всебічного аналізу, обґрунтування та аргументації; демонструє середній рівень застосування отриманих умінь і навичок під час виконання лабораторних завдань, припускаючись при цьому суттєвих неточностей та окремих помилок.

Незадовільно(з можливістю повторного складання) (35 – 59 балів) виставляється, якщо здобувач слабко володіє навчальним матеріалом. Фрагментарно, поверхово (без аргументації та обґрунтування) викладає його під час усних виступів та надання письмових відповідей; демонструє низький рівень застосування отриманих умінь і навичок під час виконання лабораторних завдань, припускаючись суттєвих помилок та неточностей.

Незадовільно (з обов'язковим повторним вивченням дисципліни) (0 – 34 бали) виставляється, якщо здобувач майже не володіє навчальним матеріалом, не в змозі розкрити зміст більшості питань під час усних виступів та надання письмових відповідей; не вміє застосовувати отримані уміння й навички під час виконання лабораторних завдань.

6. Основні навчальні ресурси

Рекомендована література

Основна:

1. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. Київ: ВПЦ «Київський університет», 2009. 479 с.
2. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. Київ: Вид. дім «КМА», 2009. 458 с.
3. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Гімназія, 2008. 443 с.
4. Курта С.А. Будова речовини. Івано-Франківськ. 2007. 162 с.
5. Вакарчук І.О. Квантова механіка. Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2004.784 с.
6. Юхновський І.Р. Основи квантової механіки. Київ: Либідь, 2002. 390 с.
7. Ferro-Costas, D., Fernández-Ramos, A. New computational tools for chemical kinetics: the Cathedral Package. Theor Chem Acc. 2023. 142, 76 p. https://doi.org/10.1007/s00214-023-03012-w
8. John A. Keith, Valentin Vassilev-Galindo, Bingqing Cheng, Stefan Chmiela, Michael Gastegger, Klaus-Robert Müller, and Alexandre Tkatchenko *Chemical Reviews.* 2021. 121 (16). P. 9816-9872. DOI: 10.1021/acs.chemrev.1c00107
9. Martínez-Núñez, G. L. Barnes, D. R. Glowacki, S. Kopec, D. Peláez, A. Rodríguez, R. Rodríguez-Fernández, R. J. Shannon, J. J.P. Stewart, P. G. Tahoces, S. A. Vazquez, *J. Comput. Chem.* 2021, 42(28), 2036. https://doi.org/10.1002/jcc.26734
10. Lei He, Lu Bai, Dionysios D. Dionysiou, Zongsu Wei, Richard Spinney, Chu Chu, Zhang Lin, Ruiyang Xiao, Applications of computational chemistry, artificial intelligence, and machine learning in aquatic chemistry research, Chemical Engineering Journal, Volume 426, 2021, 131810, ISSN 1385-8947, https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.131810.
11. Jensen, Frank. Introduction to Computational Chemistry, 3rd ed. Chichester: John Wiley & Sons, 2017.
12. Schlick, Tamar. Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide, 2nd ed. New York: Springer Science+Business Media, 2010.
13. Cramer, Christopher J. Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd ed. John Wiley & Sons Ltd, 2004.

Інформаційні ресурси

1. Методичні рекомендації до організації самостійної роботи з обов'язкової освітньої компоненти «Квантова хімія» для підготовки здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти / Укладачі Н. В. Кусяк, В. В. Листван, О.Ю. Кичкирук, О.В. Ходюк, Житомир: Вид-во ЖДУ ім.І. Франка, 2025. 43 с. URL: https://eprints.zu.edu.ua/45502/1/1.pdf
2. Квантовий світ: від фундаментальної науки до технологій майбутнього. URL: https://library.knu.ua/virtualna-vystavka/kvantovyj-svit-vid-fundamentalnoyi-nauky-do-tehnologij-majbutnogo.html
3. Квантова система наносистем. URL: https://isc.gov.ua/index.php/ua/publishing-activities/quantum-chemistry-of-nanosystems

7. Регуляції і політики курсу

Відвідування занять. Регуляція пропусків.

Відвідування занять обов'язкове, оскільки курс спрямовано на поглиблене вивчення питань медико-екологічного спрямування, що може для студентів становити певну складність, враховуючи тільки попереднє знання змісту дисципліни «Квантова хімія».

З метою запобігання виникнення нещасних випадків враження електричним струмом, пожеж тощо слід знати та виконувати правила з техніки безпеки при роботі на електрообладнанні, правила виробничої санітарії й пожежної профілактики. Студенти допускаються до проведення лабораторних занять тільки після інструктажу з охорони праці та протипожежної безпеки з відповідним записом у журналі інструктажу. Обов'язкова присутність студентів на лабораторних заняттях у білих халатах. На кожне лабораторне заняття мають бути опрацьовані питання для обговорення. Пропуски можливі лише з поважної причини. Відпрацювання пропущених занять має бути регулярним за домовленістю з викладачем у години консультацій. Накопичення відпрацювань неприпустиме! За умови систематичних пропусків може бути застосована процедура повторного вивчення дисципліни (див. посилання на Положення у додатку до силабусу).

Політика академічної доброчесності

Кожний студент зобов'язаний дотримуватися принципів академічної доброчесності. Письмові завдання з використанням часткових або повнотекстових запозичень з інших робіт без зазначення авторства – це *плагіат*. Використання будь-якої інформації (текст, фото, ілюстрації тощо) мають бути правильно процитовані з посиланням на автора! Якщо ви не впевнені, що таке плагіат, фабрикація, фальсифікація, порадьтеся з викладачем. До студентів, у роботах яких буде виявлено списування, плагіат чи інші прояви недоброчесної поведінки можуть бути застосовані різні дисциплінарні заходи (див. посилання на Кодекс академічної доброчесності ЗНУ в додатку до силабусу).

Використання комп'ютерів/телефонів на занятті

Будь ласка, вимкніть на беззвучний режим свої мобільні телефони та не користуйтеся ними під час занять. Мобільні телефони відволікають викладача та ваших колег. Під час занять заборонено надсилання текстових повідомлень, прослуховування музики, перевірка електронної пошти, соціальних мереж тощо. Електронні пристрої можна використовувати лише за умови виробничої необхідності в них (за погодженням з викладачем).

Комунікація

Очікується, що студенти перевірятимуть свою електронну пошту і сторінку дисципліни в Moodle та реагуватимуть своєчасно. Всі робочі оголошення можуть надсилатися через старосту, на електронну на пошту та розміщуватимуться в Moodle. Будь ласка, перевіряйте повідомлення вчасно. *Ел. пошта має бути підписана справжнім ім'ям і прізвищем*. Адреси типу user123@gmail.comне приймаються!

Визнання результатів неформальної/інформальної освіти. Порядок зарахування результатів навчання, підтверджених сертифікатами, свідоцтвами, іншими документами, здобутими

поза основним місцем навчання, регулюється Положенням про порядок визнання результатів навчання, отриманих у неформальній освіті: https://tinyurl.com/y8gbt4xs.

ДОДАТКОВА ІНФОРМАЦІЯ

ГРАФІК ОСВІТНЬОГО ПРОЦЕСУ НА 2026-2027 н.р. доступний за адресою: https://sites.znu.edu.ua/navchalnyj_viddil/1635.ukr.html.

НАВЧАННЯ ТА ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ЯКОСТІ ОСВІТИ. Перевірка набутих студентами знань, навичок та вмінь є невід'ємною складовою системи забезпечення якості освіти і проводиться відповідно до Положення про організацію та методику проведення поточного та підсумкового семестрового контролю навчання студентів ЗНУ https://lnk.ua/gk4x2wkVy.

ПОВТОРНЕ ВИВЧЕННЯ ДИСЦИПЛІН. Наявність академічної заборгованості до 6 навчальних дисциплін (у тому числі проходження практики чи виконання курсової роботи) за результатами однієї екзаменаційної сесії є підставою для надання студенту права на повторне вивчення зазначених навчальних дисциплін. Процедура повторного вивчення визначається Положенням про порядок повторного вивчення навчальних дисциплін та повторного навчання у ЗНУ: https://lnk.ua/9MVwgEpVz .

ВИРІШЕННЯ КОНФЛІКТІВ. Порядок і процедури врегулювання конфліктів, пов'язаних із корупційними діями, зіткненням інтересів, різними формами дискримінації, сексуальними домаганнями, міжособистісними стосунками та іншими ситуаціями, що можуть виникнути під час навчання, регламентуються Положенням про порядок і процедури вирішення конфліктних ситуацій у ЗНУ: https://lnk.ua/EYNg6GpVZ .

Конфліктні ситуації, що виникають у сфері стипендіального забезпечення здобувачів вищої освіти, вирішуються стипендіальними комісіями факультетів, коледжів та університету в межах їх повноважень, відповідно до: Положення про порядок призначення і виплати академічних стипендій у ЗНУ: https://lnk.ua/QRVdWGwe3; Положення про призначення та виплату соціальних стипендій у ЗНУ: https://lnk.ua/3R4avGqeJ.

ПСИХОЛОГІЧНА ДОПОМОГА. Телефон довіри практичного психолога **Марті Ірини Вадимівни** (061) 228-15-84, (099) 253-78-73 (щоденно з 9 до 21).

УПОВНОВАЖЕНА ОСОБА З ПИТАНЬ ЗАПОБІГАННЯ ТА ВИЯВЛЕННЯ КОРУПЦІЇ Запорізького національного університету: **Банах Віктор Аркадійович**

Електронна адреса: v_banakh@znu.edu.ua

Гаряча лінія: тел. (061) 227-12-76, факс 227-12-88

РІВНІ МОЖЛИВОСТІ ТА ІНКЛЮЗИВНЕ ОСВІТНЄ СЕРЕДОВИЩЕ. Центральні входи усіх навчальних корпусів ЗНУ обладнані пандусами для забезпечення доступу осіб з інвалідністю та інших маломобільних груп населення. Допомога для здійснення входу у разі потреби надається черговими охоронцями навчальних корпусів. Спеціалізована допомога: (061) 228-75-11 (начальник охорони). Порядок супроводу (надання допомоги) осіб з інвалідністю та інших маломобільних груп населення у ЗНУ: https://lnk.ua/5pVJr17VP.

РЕСУРСИ ДЛЯ НАВЧАННЯ

НАУКОВА БІБЛІОТЕКА: https://library.znu.edu.ua/. Графік роботи абонементів: понеділок-п`ятниця з 08.00 до 16.00; вихідні дні: субота і неділя.

СИСТЕМА ЕЛЕКТРОННОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ НАВЧАННЯ ЗАПОРІЗЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ (СЕЗН ЗНУ): https://moodle.znu.edu.ua/.

Посилання для відновлення паролю: https://moodle.znu.edu.ua/mod/page/view.php?id=133015.

ЦЕНТР ІНТЕНСИВНОГО ВИВЧЕННЯ ІНОЗЕМНИХ МОВ: https://sites.znu.edu.ua/child-advance/.