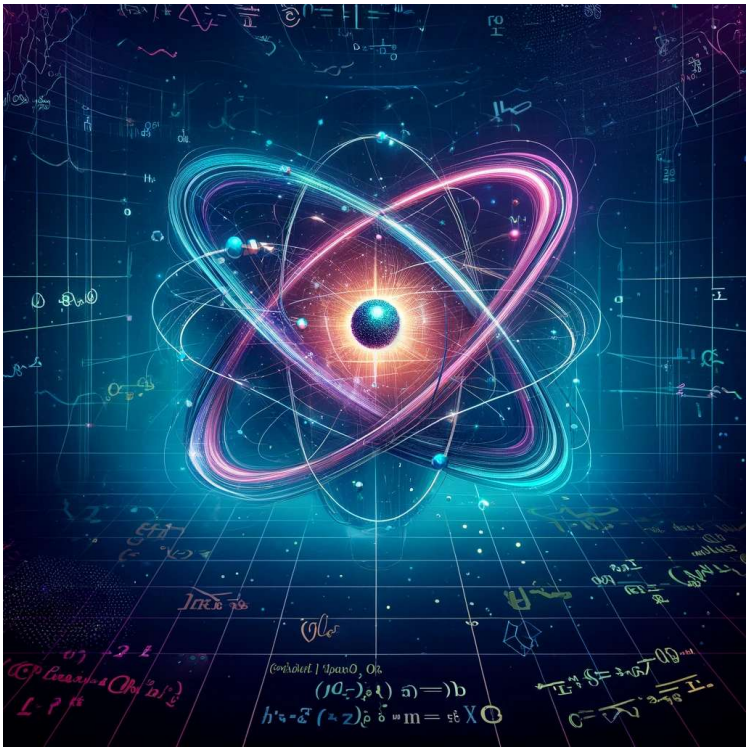
Презентація курсу “Квантова хімія”



Курс складається з двох навчальних модулів: «Основи квантової механіки», «Основні методи квантової хімії».

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.

Ква́нтова хі́мія — міждисциплінарна галузь науки, яка використовує засади квантової механіки для чисельних розрахунків структур та властивостей хімічних молекул. Методи квантової хімії дозволяють доволі точно (до 1 пм) розрахувати взаємне розташування атомів у молекулі, визначити кути між хімічними зв'язками, розрахувати енергії основних станів молекул і теплоту хімічних реакцій, а також визначити шляхи, якими ці реакції здійснюються.

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.