

Код та назва дисципліни	1-102-9_Квантово-хімічне моделювання спектральних характеристик речовин
Рекомендується для галузі знань (спеціальності, освітньої програми)	10 Природничі науки; 16 Хімічна та біоінженерія; 18 Виробництво та технології
Кафедра	ХФХ
П.І.П. НПП (за можливості)	Проф. Оковитий С.І.
Рівень ВО	перший (бакалаврський)
Курс, семестр (на якому буде викладатись)	III_IV
Мова викладання	українська
Пререквізити (передумови вивчення дисципліни)	Знання базових курсів неорганічної, фізичної, органічної хімії
Що буде вивчатися	Сучасні підходи до комп'ютерного моделювання спектральних характеристик речовин за допомогою квантово-хімічних методів
Чому це цікаво/треба вивчати	Перспективи роботи в науково-дослідних підрозділах та аналітичних лабораторіях
Чому можна навчитися (результати навчання)	Знати методи моделювання спектрів (електронних, коливальних, ядерного магнітного резонансу) для встановлення структури сполук та йонних асоціатів, що дозволить оптимізувати методики кількісного аналізу речовин
Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)	Здатність розв'язувати спеціалізовані задачі та практичні проблеми в різних галузях хімії
Інформаційне забезпечення	Методичні матеріали, лекції, презентації 1. Оковитий, С.І., Бондаренко Я.С. Лабораторний практикум із дисципліни «Теоретичне моделювання динаміки хімічних систем». – Д: РВВ ДНУ, 2012. (друк) 2. Оковитий С.І., Бондаренко Я.С. Лабораторний практикум із дисципліни «Комп'ютерне моделювання хімічних систем» – Д: РВВ ДНУ, 2012. (друк) 3. Оковитий С.І. Борисенко І.О. Квантово-хімічне дослідження структури та реакційної здатності хімічних сполук. Методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт – Д.: РВВ ДНУ, 2021. (друк, сайт ф-ту)
Види навчальних занять (лекції, практичні, семінарські, лабораторні заняття тощо)	Лекції, лабораторні заняття
Вид семестрового контролю	диференційований залік
Максимальна кількість здобувачів	Без обмежень
Мінімальна кількість здобувачів (для мовних та творчих дисциплін)	

Декан факультету _____

Віктор ВАРГАЛЮК