



# КВАНТОВА ХІМІЯ І КВАНТОВО-МЕХАНІЧНІ МЕТОДИ ОБЧИСЛЕННЯ (ПО1)

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

## Реквізити навчальної дисципліни

|  |  |
|--|--|
| Рівень вищої освіти                            | Другий (магістерський)   |
| Галузь знань                                   | Е Природничі науки   |
| Спеціальність                                  | Е6 Прикладна фізика та наноматеріали   |
| Освітня програма                               | Прикладна фізика   |
| Статус дисципліни                              | Обов'язкова  |
| Форма навчання                                 | очна (денна)   |
| Рік підготовки, семестр                        | 1 курс, весняний семестр   |
| Обсяг дисципліни                               | Загальна кількість: (5 кр.) 150 год.<br>Лекційних занять: 30 год.<br>Практичних занять: 30 год.<br>Самостійна робота студентів: 90 год.  |
| Семестровий контроль /<br>контрольні заходи    | екзамен, поточний контроль, модульна контрольна робота, домашня<br>контрольна робота   |
| Розклад занять                                 | <a href="http://ipt.kpi.ua/navchalinij-protses">http://ipt.kpi.ua/navchalinij-protses</a>  |
| Мова викладання                                | Українська   |
| Інформація про керівника курсу /<br>викладачів | Лектор: доцент, к.ф.-м.н., доцент Пономаренко Сергій Миколайович<br>( <a href="mailto:s.ponomarenko@kpi.ua">s.ponomarenko@kpi.ua</a> ).  |
| Розміщення курсу                               | <a href="https://do.ipo.kpi.ua/course/view.php?id=1263">https://do.ipo.kpi.ua/course/view.php?id=1263</a><br><a href="https://classroom.google.com/c/MjI0NzY1NTA50TMy?cjc=oazzjpz7">https://classroom.google.com/c/MjI0NzY1NTA50TMy?cjc=oazzjpz7</a> |

## Програма навчальної дисципліни

### 1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Дисципліна «Квантова хімія і квантово-механічні методи обчислення» є фундаментальною професійною складовою підготовки сучасного фахівця в галузі прикладної фізики та наноматеріалів. Вона базується на квантовій механіці та квантовій хімії, інтегруючи їх із методами комп’ютерного моделювання, що забезпечує кількісний опис електронної структури, молекулярної організації та властивостей речовини. Курс поєднує теоретичні засади побудови моделей з практичними алгоритмами чисельного розв’язання, які необхідні для аналізу та прогнозування поведінки складних фізичних і хімічних систем. Особливий акцент зроблено на обчислювальному експерименті, який у сучасній науці поряд із теорією та лабораторними дослідженнями виступає рівноправним інструментом пізнання та створення нових матеріалів і технологій.

Завдяки цьому дисципліна є підґрунтям, що дає можливість вивчати широкий спектр об'єктів — від наноструктур і функціональних поверхонь до біомолекул та енергетичних матеріалів. Вона формує не лише глибоке розуміння природи мікроскопічних процесів, але й практичні навички застосування квантово-механічних методів для розв'язання актуальних завдань науки й технологій.

## Загальні компетентності ОНП

- ЗК 1: Здатність до абстрактного та аналітичного мислення, розуміння основних концепцій, парадигми та ідей прикладної фізики.
- ЗК 5: Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології для вирішення задач в дослідницькій діяльності

## Фахові компетентності ОНП

- ФК 2: Здатність до безперервного поглиблення фундаментальних знань та систематичного вивчення та аналізу нової науково-технічної інформації, світового досвіду в галузі прикладної фізики та наноматеріалів.
- ФК 3: Здатність застосовувати теоретичні знання для аналізу фізичних систем, явищ і процесів в галузі прикладної фізики та наноматеріалів.
- ФК 10: Здатність до аналізу фізичних принципів імплементації інформаційних процесів в фізичних системах, в тому числі в енергетиці та біофізиці.
- ФК 11: Здатність до вибору методів дослідження структури, складу та властивостей матеріалів (наноматеріалів), що використовуються або застосовуються в фізичних, біофізичних та енергетичних системах, вибору оптимальних параметрів дослідження і розуміння границь застосування обраного методу.

## Програмні результати навчання

- ПРН 2: Знання методів теоретичної фізики, спеціальних розділів вищої математики, програмування, прикладних програм і методів обчислення на рівні, необхідному для аналізу і моделювання фізичних процесів і систем.
- ПРН 4: Знання методів теоретичної фізики, спеціальних розділів вищої математики на рівні, необхідному для розуміння функціонування та моделювання процесів, що відбуваються в технологічних та технічних системах, в тому числі інформаційних.
- ПРН 9: Вміння застосовувати фізичні, математичні та комп’ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, розробки приладів, нових матеріалів і наукових технологій в області біофізики, енергетичних та інформаційних систем (залежно від освітньої траєкторії).

## 2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Для засвоєння матеріалу курсу «Квантова хімія і квантово-механічні методи обчислення» студенти повинні засвоїти термінологію та поняття курсів:

1. Програмування;
2. Хімія;
3. Обчислювальні методи;
4. Атомна фізика;
5. Квантова механіка;
6. Статистична фізика;
7. Фізика твердого тіла.

Також повинні вміти програмувати, використовувати математичний апарат: операції з матрицями, диференціювати, інтегрувати, розв'язувати диференціальні рівняння.

Отримані практичні навички та засвоєні теоретичні знання під час вивчення навчальної дисципліни «Квантова хімія і квантово-механічні методи обчислення» можна використовувати в подальшому в навчальних дисциплінах, пов'язаних з теоретичними та практичними аспектами прикладної фізики.

### 3. Зміст навчальної дисципліни

Розділ 1. Предмет, методи, гіпотези та моделі квантової хімії.

Тема 1.1 Рівняння Шредінгера. Квантовомеханічний опис структури атома водню та його спектрів.

Тема 1.2 Спін електрона. Рівняння Паулі.

Тема 1.3 Історія виникнення квантової хімії та квантово-механічних розрахунків. Сучасні досягнення та перспективи розвитку галузі.

Розділ 2. Багатоелектронні атоми.

Тема 2.1 Одноелектронна модель та методи її реалізації для розрахунку багатоелектронних атомів.

Тема 2.2 Методи теорії збурень.

Тема 2.3 Варіаційний принцип.

Тема 2.4 Рівняння Хартрі та Хартрі-Фока.

Тема 2.5 Програми для квантово-механічних обчислень електронної структури та властивостей багатоелектронних атомів.

Розділ 3. Молекулярна структура.

Тема 3.1 Поняття молекулярної структури та наближення Борна-Оппенгеймера.

Тема 3.2 Методи молекулярної динаміки.

Розділ 4. Квантово-механічні методи розрахунку структури.

Тема 4.1 Природа хімічного зв'язку. Метод МО ЛКАО та метод валентних схем.

Тема 4.2 Одноелектронне наближення. Рівняння Хартрі-Фока.

Тема 4.3 Неемпіричні (*ab-initio*) методи квантово-механічних обчислень та їх точність. Рівняння Хартрі-Фока-Рутаана. Базисні набори.

Тема 4.4 Врахування електронної кореляції. Пост-хартріфоківські методи.

Тема 4.5 Поняття про метод функціонала електронної густини (DFT-method).

Тема 4.6 Застосування прикладних програм для квантово-хімічних розрахунків структури молекул.

Розділ 5. Властивості молекулярних систем.

Тема 5.1 Електричні та магнітні властивості молекул.

Тема 5.2 Спектральні характеристики молекул.

Тема 5.3 Обчислення спектрів та властивостей у квантово-хімічних програмах.

## 4. Навчальні матеріали та ресурси

Нижче наводиться перелік навчальних матеріалів та ресурсів для засвоєння матеріалу, розглядуваного на лекційних заняттях та для додаткового вивчення.

### Основні

1. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К. : ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с. — ISBN 978-966-439-160-0.
2. Слема Л. О., Іванов В. В. Квантова хімія. — Х. : Фоліо, 2007. — 443 с. — ISBN 978-966-8319-93-8.

### Додаткові

4. Levine I. N. Quantum Chemistry. — 7th ed. — Pearson, 2014. — 714 p. — ISBN 978-0321803450.
5. Mathematical Physics in Theoretical Chemistry / ed. by S. M. Blinder, J. E. House. — Elsevier, 2019. — 412 p. — (Developments in Physical & Theoretical Chemistry). — ISBN 978-0-12-813651-5.
6. Atkins P. W., Friedman R. Molecular quantum mechanics. — 4th ed. — Oxford University Press, 2005. — 588 p. — ISBN 0-19-927498-3.
7. Sauer S. P. A. Molecular Electromagnetism: A Computational Chemistry Approach. — Oxford University Press, 2011. — 321 с. — ISBN 978-0-19-957539-8.

### Програмні продукти

8. PySCF Team. PySCF. — 2025. — URL: <https://pyscf.org/quickstart.html>.
9. Gaussian & GaussView Tutorial Videos. — URL: <https://gaussian.com/videos/>.
10. ORCA: An ab initio, DFT and semiempirical SCF-MO package. — URL: [https://kofo.mpg.de/media/2/D19114521/4329011608/orca\\_manual-opt.pdf](https://kofo.mpg.de/media/2/D19114521/4329011608/orca_manual-opt.pdf).
11. ORCA Input Library. — URL: <https://sites.google.com/site/orcainputlibrary/>.
12. Multiwfn: program for realizing electronic wavefunction analysis. — URL: <http://sobereva.com/multiwfn/>.
13. Chemcraft: a graphical program for working with quantum chemistry computations. — URL: <http://www.chemcraftprog.com>.

### Online-ресурси

14. Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase. — URL: <https://cccbdb.nist.gov>.
15. Basis Set Exchange: A repository for quantum chemistry basis sets. — URL: <https://www.basissetexchange.org>.
16. Basis Sets. — URL: <https://gaussian.com/basissets/>.

### Оглядові наукові статті

17. PySCF: the Python-based simulations of chemistry framework / Q. Sun [та ін.] // Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. — 2018. — Т. 8, № 1. — e1340. — DOI: [10.1002/wcms.1340](https://doi.org/10.1002/wcms.1340).
18. Recent developments in the PySCF program package / Q. Sun [et al.] // Journal of Chemical Physics. — 2020. — Vol. 153, no. 2. — P. 024109. — DOI: [10.1063/5.0006074](https://doi.org/10.1063/5.0006074).
19. The ORCA quantum chemistry program package / F. Neese, F. Wennmohs, U. Becker, C. Ripplinger // J. Chem. Phys. — 2020. — Vol. 152, issue 22. — DOI: [10.1063/5.0004608](https://doi.org/10.1063/5.0004608).

20. Quantum Chemistry in the Age of Quantum Computing / Y. Cao [et al.] // Chemical Reviews. — 2019. — Vol. 119, issue 19. — ISSN 15206890. — DOI: [10.1021/acs.chemrev.8b00803](https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00803).
21. Dral P. O. Quantum Chemistry in the Age of Machine Learning // Journal of Physical Chemistry Letters. — 2020. — Vol. 11, issue 6. — ISSN 19487185. — DOI: [10.1021/acs.jpclett.9b03664](https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.9b03664).
22. Quantum computational chemistry / S. McArdle, S. Endo, A. Aspuru-Guzik, S. C. Benjamin, X. Yuan // Reviews of Modern Physics. — 2020. — Vol. 92, issue 1. — ISSN 15390756. — DOI: [10.1103/RevModPhys.92.015003](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.92.015003).
23. Liu W. Ideas of relativistic quantum chemistry. — 2010. — DOI: [10.1080/00268971003781571](https://doi.org/10.1080/00268971003781571).
24. Haag M. P., Reiher M. Real-time quantum chemistry // International Journal of Quantum Chemistry. — 2013. — T. 113, вип. 1. — ISSN 00207608. — DOI: [10.1002/qua.24336](https://doi.org/10.1002/qua.24336).
25. Ho M., Hernández-Perez J. M. Evaluation of Gaussian Molecular Integrals. I Overlap Integrals // The Mathematica Journal. — 2012. — Vol. 14.
26. Ho M., Hernández-Perez J. M. Evaluation of Gaussian Molecular Integrals. II. Kinetic-Energy Integrals // The Mathematica Journal. — 2013. — Vol. 15.
27. Ho M., Hernández-Perez J. M. Evaluation of Gaussian Molecular Integrals. III. Nuclear-Electron Attraction Integrals // The Mathematica Journal. — 2014. — Vol. 16.

## Навчальний контент

### 5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Навчання здійснюється на основі студентоцентрованого підходу та стратегії взаємодії викладача та студента для засвоєння студентами матеріалу та розвитку у них практичних навичок. Для проведення занять застосовується практичний метод. Для лекційних занять використовуються пояснлювально-ілюстративний метод та метод проблемного виконання, для проведення лабораторних робіт використовується частково-пошуковий та дослідницький методи навчання, при яких викладач ставить перед студентами проблему, і ті вирішують її самостійно або під керівництвом викладача, висуваючи ідеї, перевіряючи їх, підбираючи для цього необхідні джерела інформації, методи, підходи тощо.

## Програмне забезпечення

| Назва ПЗ                        | Характеристика та призначення   |
|---------------------------------|---|
| ORCA 6.x                        | Спеціалізоване програмне забезпечення для квантово-хімічних обчислень, яке використовується в курсі для моделювання молекулярних систем.  |
| Python 3.x                      | Вільно розповсюджуване середовище програмування. NumPy-бібліотека використовується для розрахунків. Matplotlib-бібліотека — для побудови графіків. SymPy-бібліотека — для символної математики, використовується для аналітичного розв'язання рівнянь електростатики та магнетизму, перевірки формул. |
| PySCF                           | PySCF — це безкоштовна бібліотека для Python із відкритим вихідним кодом для квантово-хімічних обчислень, яка випускається під ліценією Apache-2.0.   |
| Multiwfn                        | Програма для проведення аналізу електронних хвильових функцій. Вона безкоштовна, з відкритим вихідним кодом, високоекспективна, дуже зручна і гнучка, вона підтримує майже всі найважливіші методи аналізу хвильових функцій.   |
| Google Colab                    | Хмарна платформа для запуску Python-коду без локального встановлення. Дає змогу студентам виконувати обчислення, будувати графіки, подавати звіти в інтерактивному вигляді  |
| Л <sup>A</sup> T <sub>E</sub> X | Система верстки для підготовки наукових звітів. Використовується студентами для оформлення звітів, розрахунково-графічних робіт з формулами та графіками.   |

## Лекційні заняття

| №   | Назва теми лекції та перелік основних питань  |
|---|---|
| Розділ 1. Предмет, методи, гіпотези та моделі квантової хімії |   |
| 1.  | <p><b>Рівняння Шредінгера.</b> Квантовомеханічний опис структури атома водню. Стани електрона в атомі водню та квантові числа. Пояснення спектрів. Спін електрона. Поняття мультиплетності. Історія виникнення квантової хімії та квантово-механічних розрахунків. Об'єкт, предмет дослідження квантової хімії. Сучасні досягнення та перспективи розвитку галузі.</p> <p>Література для опрацювання: [1, Розділ 1], [28, Глава I, II, IV], [29, Глава 3, § 3.1]</p>  |
| Розділ 2. Багатоелектронні атоми                              |   |
| 2.  | <p><b>Варіаційний принцип та розв'язки рівняння Шредінгера.</b> Атом гелію. Ортогелій, парагелій. Застосування теорії збурень та варіаційного принципу для розрахунку енергії основного стану атома гелію. Проблема точного опису двоелектронного атому. Атомні електронні конфігурації і терми.</p> <p>Література для опрацювання: [1, Розділ 2. §2.2], [28, Глава V], [29, Глава 2]</p>   |
| 3.  | <p><b>Одноелектронна модель та методи її реалізації для розрахунку багатоелектронних атомів.</b> Метод самоузгодженого поля (метод Хартрі) та метод Хартрі-Фока для розрахунку електронної структури багатоелектронного атому. Детермінант Слейтера. Атомні орбіталі. Канонічні орбіталі. Орбіталі слейтерівського типу (STO). Оболонкова модель атома та метод Кона-Шема. Трактування розв'язків одноелектронної моделі з точки зору хімії. Теорема Купманса.</p> <p>Література для опрацювання: [28, Глава VI], [29, Глава 2, § 2.1, 2.2, 2.3, 2.6]</p> |

| №                                      | Назва теми лекції та перелік основних питань   |
|--|--|
| 4.                                     | <p><b>Програми для квантово-механічних обчислень електронної структури та властивостей багатоелектронних атомів.</b> Алгоритми розрахунку властивостей багатоелектронних атомів методом Хартрі-Фока. Порівняння результатів хартрі-фоковських розрахунків атомів з експериментом. Обмінна та кулонівська кореляції. Застосування прикладних програм для розрахунків електронної густини та характеристик багатоелектронних атомів.</p> <p><i>Література для опрацювання:</i> [29, Глава 2, § 2.6, 2.7], [9], [12]</p> <p><i>Завдання на CPC:</i> Розрахуйте характеристики атомів 1-го та 2-го періоду</p> |
| <b>Розділ 3. Молекулярна структура</b> |  |
| 5.                                     | <p><b>Силовий та енергетичний аспекти опису хімічного зв'язку.</b> Проблема означення поняття «хімічний зв'язок». Метод валентних зв'язків як розвиток теорії Гайтлера-Лондона. Резонансні структури. Теорема Гельмана-Файнмана. Теорема віріалу.</p> <p><i>Література для опрацювання:</i> [2, Глава 11], [29, Глава 4, § 4.1]</p>  |
| 6.                                     | <p><b>Пояснення природи хімічного зв'язку в рамках одноелектронної моделі.</b> Молекулярні орбіталі та їх класифікація. Заселеність атомних орбіталей. Геометрична будова багатоатомних молекул. Локалізація і гібридизація орбіталей. Просторовий розподіл електронної густини. Індекси вільної валентності. Дипольні та квадрупольні моменти молекул. Спорідненість до електрона, електронегативність.</p> <p><i>Література для опрацювання:</i> [29, Глава 3, § 3.7], [2, Глава 9]</p>  |
| 7.                                     | <p><b>Поняття молекулярної структури та наближення Борна-Оппенгеймера.</b> Наближення Борна-Оппенгеймера. Відокремлення електронної задачі від ядерної. Теорія Гайтлера-Лондона для молекули <math>H_2</math>. Порівняння результатів розрахунків <math>H_2</math> методом Гайтлера-Лондона з експериментом.</p> <p><i>Література для опрацювання:</i> [28, Глава VIII], [29, Глава 3, § 3.1]</p>  |
| 8.                                     | <p><b>Застосування одноелектронної моделі для розрахунку молекул.</b> Метод Хартрі-Фока. Наближення МО ЛКАО. Рівняння Рутана. Способи врахування електронної кореляції в одноелектронній моделі. Молекулярний іон водню <math>H_2^+</math>.</p> <p><i>Література для опрацювання:</i> [29, Глава 3, §§ 3.2, 3.3], [2, Глава 14, § 14.2]</p>  |
| 9.                                     | <p><b>Неемпіричні (<i>ab-inito</i>) методи квантово-механічних розрахунків та їх точність.</b> Базисні функції. Поняття про мінімальний та розширеній базиси. Орбіталь гаусового типу (GTO). Точність неемпіричних методів розрахунку. Рахування електронної кореляції. Ієрапхія методів розрахунку (діаграма Поппла).</p> <p><i>Література для опрацювання:</i> [29, Глава 3, §§ 3.5, 3.6], <i>Завдання на CPC:</i> Розрахуйте характеристики двоатомних молекул</p>  |
| 10.                                    | <p><b>Поняття про метод функціонала електронної густини (DFT-method).</b> Застосування DFT для розрахунку молекул.</p> <p><i>Література для опрацювання:</i> [29, Глава 3, § 3.4]</p>  |
| 11.                                    | <p><b>Напівемпіричні методи розрахунку молекул.</b> Ідея нульового диференціального перекриття. Метод Хюккеля.</p> <p><i>Література для опрацювання:</i> [28, Глава XI], [29, Глава 3, § 3.7], [2, Глава 13, §§ 13.2, 13.3]</p>  |
| 12.                                    | <p><b>Застосування прикладних програм для квантово-механічних розрахунків молекул.</b> Застосування комплексу прикладних програм ORCA та пакета PySCF. Візуалізатори Avogadro. Вибір розрахункового методу для вирішення різних типів задач. Способи задавання вихідних координат атомів та розрахунок їх характеристик. Точкові розрахунки (Single Point). Оптимізація геометрії (Geometry Optimization) та перерізи поверхонь потенціальної енергії.</p> <p><i>Література для опрацювання:</i> [10, 11, 12, 13, 8]</p>   |

| №   | Назва теми лекції та перелік основних питань   |
|---|--|
| <b>Розділ 4. Кавнтово-механічні методи розрахунку структури</b> |  |
| 13.   | <b>Силовий та енергетичний аспекти опису хімічного зв'язку.</b> Проблема означення поняття «хімічний зв'язок». Метод валентних зв'язків як розвиток теорії Гайтлера-Лондона. Резонансні структури. Теорема Гельмана-Файнмана. Теорема віріалу.<br><i>Література для опрацювання:</i> [2, Глава 11], [29, Глава 4, § 4.1]   |
| 14.   | <b>Пояснення природи хімічного зв'язку в рамках одноелектронної моделі.</b> Молекулярні орбіталі та їх класифікація. Заселеність атомних орбіタルей. Геометрична будова багатоатомних молекул. Локалізація і гібридизація орбіталей. Просторовий розподіл електронної густини. Індекси вільної валентності. Дипольні та квадрупольні моменти молекул. Спорідненість до електрона, електронегативність.<br><i>Література для опрацювання:</i> [29, Глава 3, § 3.7], [2, Глава 9]  |
| <b>Розділ 5. Властивості молекулярних систем</b>                |  |
| 15.   | <b>Електричні та магнітні властивості.</b> Дипольний момент, квадрупольний момент та вищі мультипольні моменти: характеризують розподіл заряду у молекулі. Поляризовність і гіперполяризовність: відповідають за нелінійно-оптичні ефекти та індуковані моменти. Магнітна сприйнятливість і магнітні моменти: важливі для опису діамагнітних, парамагнітних та ферромагнітних систем. Спінові густини та розподіл електронів: ключові для інтерпретації магнітно-резонансних експериментів.<br><i>Література для опрацювання:</i> [7, с. 4.1 — 4.4, 5.1 — 5.4], [6, р. 12] |
| 16.   | <b>Спектральні характеристики молекул.</b> Електронні спектри (поглинання, люмінесценція): пов'язані з переходами між електронними станами. Коливальні та обертальні спектри: дають інформацію про геометрію та динаміку молекул. Ядерний магнітний резонанс (ЯМР), електронний парамагнітний резонанс (ЕПР): дозволяють дослідити локальні електронні й магнітні середовища атомів. Інфрачервона (ІЧ) та раманівська спектроскопія: чутливі до симетрії та типу хімічних зв'язків.<br><i>Література для опрацювання:</i> [7, с. 4.5 — 4.6, 5.5 — 5.10, 10], [6, р. 13]    |
| 17.   | <b>Обчислення спектрів та властивостей у квантово-хімічних програмах.</b> Розрахунки спектрів: CI, CC та TDDFT для електронних збуджень, аналіз нормальних мод для ІЧ і Рамана, квантово-хімічні параметри для ЯМР та ЕПР.<br><i>Література для опрацювання:</i> [7, с. 11]  |

## Практичні заняття

| №  | Назва теми заняття та перелік розглядуваних питань  |
|----|---|
| 1. | Основи роботи <b>ORCA</b> та в <b>Python/PySCF</b> . Встановлення та налаштування.  |
| 2. | Розрахунок атома водню в <b>ORCA</b> та в <b>Python/PySCF</b> .   |
| 3. | Розрахунок атома гелію в <b>ORCA</b> в <b>Python/PySCF</b> . Побудова молекулярних орбіталей на основі базису.  |
| 4. | Розрахунок атома літію та інших багатоелектронних атомів в <b>ORCA</b> та в <b>Python/PySCF</b> . Побудова молекулярних орбіталей та радіального розподілу густини за допомогою <b>Multiwfn</b> . |
| 5. | Побудова молекулярних систем в програмі <b>Avogadro</b> . Оптимізація структури за допомогою вбудованих методів молекулярної механіки.  |
| 6. | Розрахунок енергії основного стану для двоатомних молекул. Оптимізація геометрії квантово-хімічними методами.   |
| 7. | Пост-Хартрі-Фоківські методи. Розрахунки методами <b>CI</b> , <b>CC</b> та <b>DFT</b> .   |

| №  | Назва теми заняття та перелік розглядуваних питань         |
|----|--|
| 8. | Розрахунок спектрів та властивостей багатоатомних молекул. |
| 9. | Розрахунок властивостей кристалів.                         |

## 6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студентів має на меті розвиток творчих здібностей та активізація розумової діяльності студентів, а також формування у студентів потреби безперервного самостійного поповнення знань. Завдяки самостійній роботі студенти повинні навчитись самостійно працювати з літературою, творчо сприймати навчальний матеріал і осмислювати його, сформувати навички щоденної самостійної роботи з метою одержання та узагальнення знань, умінь і навичок.

Самостійна робота над засвоєнням навчального матеріалу може виконуватися у бібліотеці, комп'ютерних класах, а також у домашніх умовах. При використанні студентами програмних продуктів передбачаються можливості отримання необхідної консультації або допомоги з боку викладача.

На самостійну роботу виділено 90 години і відводяться наступні види завдань:

- обробка і осмислення інформації, отриманої безпосередньо на лекціях, робота з відповідними підручниками та особистим конспектом лекцій (30 годин);
- виконання підготовчої роботи написання МКР (10 годин);
- робота з відповідними програмними продуктами та виконання ДКР (20 годин);
- підготовка до складання семестрового контролю (30 годин).

## Політика та контроль

## 7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

### Відвідування занять

Відвідування лекцій, а також відсутність на них, не оцінюється. Однак, студентам рекомендується відвідувати заняття, оскільки на них викладається теоретичний матеріал та розвиваються навички, необхідні для успішного написання МКР. В разі великої кількості пропусків студент може бути недопущений до екзамену.

### Пропущені контрольні заходи

Результат модульної контрольної роботи для студента, який не з'явився на контрольний захід, є нульовим. У такому разі, студент має можливість написати модульну контрольну роботу, але максимальний бал за неї буде дорівнювати 50 % від загальної кількості балів. Повторне написання модульної контрольної роботи не допускається.

### Календарний контроль

Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу, базується на поточній рейтинговій оцінці. Умовою позитивної атестації є значення поточного рейтингу студента не менше 50% від максимально можливого на час атестації. Бал, необхідний для отримання позитивного календарного контролю доноситься до студентів викладачем не пізніше ніж за 2 тижні до початку календарного контролю.

## **Академічна добочесність**

Політика та принципи академічної добочесності визначені у розділі 3 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

## **Норми етичної поведінки**

Норми етичної поведінки студентів і працівників визначені у розділі 2 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

## **Процедура оскарження результатів контрольних заходів**

Студенти мають можливість підняти будь-яке питання, яке стосується процедури контрольних заходів та очікувати, що воно буде розглянуто згідно із наперед визначеними процедурами (згідно «Положення про систему забезпечення якості вищої освіти у Національному технічному університеті України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», «Положення про організацію навчального процесу»).

## **8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (РСО)**

Видами контролю успішності засвоєння матеріалу дисципліни є оцінка на лекціях під час бліц-опитувань, модульна контрольна робота (МКР), домашня контрольна робота (ДКР) та семестровий контроль.

### **Бліц-опитування на лекційних заняттях**

На початку заняття проводиться бліц-опитування, за відповідь на запитання якого, студент може отримати максимум 2 бали.

### **Модульна контрольна робота**

МКР проводиться після завершення третього розділу курсу «Квантова хімія і квантово-механічні методи обчислення» і проводиться протягом 1-ї академічної години. МКР являє собою тестування знань термінології, формулювань, основних положень та теоретичних підходів. Всі студенти отримують завдання з 10-ти тестових питань, повна відповідь на кожне з яких вимагає не більше 4-х хвилин.

Оцінюється за чіткими критеріями з позначенням коректної або некоректної відповіді, а також з коментарями, зауваженнями тощо.

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи (максимум 10 балів):

- максимальна кількість балів за кожне теоретичне питання — 1: повна правильна відповідь, 95% інформації, якщо треба наведено рисунок,
- 0.5 бали — не всі умови попереднього пункту виконано,
- 0 балів — не надано правильної відповіді, розв'язок неправильний.

### **Домашня контрольні роботи**

Домашня контрольна робота виконується студентами поступово. Після кожного практичного заняття задається завдання з ДКР, яке задаються студентами до початку наступного практичного заняття. Остаточна оцінка за ДКР виставляється на останньому практичному занятті.

### Критерії оцінювання ДКР (максимум 20 балів):

- максимальна кількість балів ставиться у випадку, якщо наведено 95% інформації, там де треба наведено рисунки, позначення, є письмовий коментар щодо базових понять, методів розрахунку, які використовуються під час виконання роботи,
- 75% балів — виконання правильне, не всі умови попереднього пункту виконано,
- 60% балів — наведено основні розрахунки, неправильні методи розрахунку.
- Не зараховуються — студент не виконав роботу, або не може її пояснити.

### Умови допуску до екзамену

В таблиці наведені умови допуску до семестрового контролю.

| № | Обов'язкова умова допуску до екзамену | Критерій  |
|---|---------------------------------------|-----------|
| 1 | Поточний рейтинговий бал              | $\geq 40$ |
| 2 | МКР                                   | виконана  |
| 3 | ДКР                                   | здана     |

Додаткові умови допуску до екзамену, які заохочуються:

- Залучення при виконанні домашньої контрольної роботи нових програмних засобів та застосунків для візуалізації результатів обрахунків, оптимізації обрахунків, використання оригінальних методик (додаються заохочувальні бали).
- Активна самостійна робота над теоретичним матеріалом: пошук та використання інформаційних ресурсів, ілюстрацій, відео, медіа ресурсів, що доповнюють поточний курс (додаються заохочувальні бали).
- Позитивний результат першої та другої атестації.

### Семестровий контроль (екзамен)

Питання, що виносяться на екзамен складаються із 2-х теоретичних питань, за кожне з яких дается максимум 20 балів.

#### Критерії оцінювання:

- максимальна кількість балів – 95% інформації, повна правильна відповідь, там де треба наведено рисунки, позначення, є письмовий коментар щодо базових понять та наведені основні формули, що повністю розкривають зміст питання.
- 75% балів — питання розкрито з незначними неточностями, не всі умови попереднього пункту виконано,
- 60% балів — питання розкрито з суттєвими неточностями.
- списані відповіді, незнання обов'язкових формул та співвідношень що розкривають зміст питання.

Остаточна оцінка R є сумою рейтингових балів отриманих за поточний контроль та балів отриманих на екзамен і після співбесіди зі студентом.

| № | Контрольний захід                | Бал | Кількість | Всього |
|---|----------------------------------|-----|-----------|--------|
| 1 | Активність на лекційних заняттях | 2   | 15        | 30     |
| 2 | Модульна контрольна робота       | 10  | 1         | 10     |
| 3 | Реферат                          | 20  | 1         | 20     |
| 4 | Екзамен                          | 40  | 1         | 40     |
|   | Всього, R                        |     |           | 100    |

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою.

| Значення рейтингу    | Оцінка ECTS  |
|----------------------|--------------|
| $95 \leq R \leq 100$ | відмінно     |
| $85 \leq R < 95$     | дуже добре   |
| $75 \leq R < 85$     | добре        |
| $65 \leq R < 75$     | задовільно   |
| $60 \leq R < 65$     | достатньо    |
| $R < 60$             | незадовільно |
| Не здані ДКР         | не допущено  |

**Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):**

**Складено:** \_\_\_\_\_ доцент, к.ф.-м.н., доцент Пономаренко Сергій Миколайович  
 (посада, науковий ступінь, вчене звання, ПІБ)

**Ухвалено:** кафедрою \_\_\_\_\_ прикладної фізики (протокол № \_\_\_\_ 8 \_\_\_\_ від \_\_\_\_ 11 червня \_\_\_\_ 2025 р.)  
 (повна назва кафедри)

**Затверджено:** Метод. комісією \_\_\_\_\_ НН ФТІ (протокол № \_\_\_\_ 6 \_\_\_\_ від \_\_\_\_ 30 червня \_\_\_\_ 2025 р.)  
 (назва інституту)