



# КВАНТОВА ХІМІЯ І КВАНТОВО-МЕХАНІЧНІ МЕТОДИ ОБЧИСЛЕННЯ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

## Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	Другий (магістерський)
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	105 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: (4 кр.) 120 год. Лекційних занять: 36 год. Практичних занять: 18 год. Самостійна робота студентів: 66 год.
Семестровий контроль / контрольні заходи	залік, поточний контроль, модульна контрольна робота, домашня 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 / викладачів	Лектор: доцент, к.ф.-м.н., доцент Пономаренко Сергій Миколайович ( <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> <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» ґрунтуються на квантовій хімії, яка в свою чергу є міждисциплінарною галуззю науки і являється фундаментом теоретичних уявлень сучасної хімії. Квантова хімія використовує засади квантової механіки для інтерпретації всіх явищ, що протікають в атомах, молекулах та твердих тілах. Методи, розроблені в квантовій хімії є універсальним і застосовується для опису будови речовин та пояснення їх властивостей і в наш час використовуються не лише в хімії, а і в прикладній науці в цілому.

Стрімкий розвиток сучасних технологій швидко змінює структуру промислового виробництва і ставить перед людством задачу підготовки сучасних фахівців в галузі прикладної науки, які здатні адаптуватися і орієнтуватися в швидких змінах наукових високих технологіях. Вивчення дисципліни «Квантова хімія і квантово-механічні методи обчислення» має на меті донесення знань про принципи і методи квантової хімії до фахівця в галузі прикладної фізики, що дасть йому змогу застосовувати їх при створенні речовин і матеріалів з наперед заданими властивостями та у інших наукових технологіях.

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

**знання:** методів квантово-механічних обчислень структури і властивостей молекул та кристалів; наближень що використовуються при розробці цих методів; фізичної природи хімічного зв'язку.

**уміння:** проводити базові квантово-механічні обчислення різними методами (напівемпіричні і неемпіричні методи); визначати необхідну інформацію для розрахунку електронної структури молекул і аналізувати дані розрахунків; орієнтуватися у великому обсязі літератури, що стосується квантово-механічних обчислень; застосовувати отримані знання на практиці для вирішення теоретичних і прикладних задач фізики та матеріалознавства.

**досвід:** користування сучасними програмами квантово-механічних обчислень на персональному комп'ютері; інтерпретації розрахунків для визначення характеристики молекул.

Згідно з вимогами освітньо-наукової програми студенти після засвоєння навчальної дисципліни «Квантова хімія і квантово-механічні методи обчислення» мають продемонструвати такі результати навчання:

## Загальні компетентності ОНП

- ЗК 1: Здатність до абстрактного та аналітичного мислення, розуміння основних концепцій, paradigm та ідей прикладної фізики.
- ЗК 2: Здатність до навчання та самонавчання шляхом пошуку, аналізу та конструктивного синтезу інформації з різних джерел.
- ЗК 7: Здатність ініціативно застосовувати знання в області прикладної фізики при вирішенні робочих питань, організації командної роботи, оцінці та забезпечені якості виконуваних робіт, реалізації проектів
- ЗК 8: Здатність до кваліфікованого проведення досліджень на відповідному рівні під керівництвом фахівців, включаючи аналіз проблем, постановку цілей і завдань, вибір методів дослідження та аналіз отриманих результатів.
- ЗК 9: Здатність адаптуватися та діяти в нових ситуаціях під тиском обставин, зокрема, здатність до самостійного освоєння нових методів дослідження, зміни наукового й виробничого профілю своєї діяльності.
- ЗК 10: Здатність генерувати нові ідеї й нестандартні підходи до їх реалізації (креативність).

## Фахові компетентності ОНП

- ФК 3: Здатність застосовувати теоретичні знання для аналізу фізичних систем, явищ і процесів в галузі прикладної фізики та наноматеріалів.
- ФК 5: Здатність аналізувати та обробляти результати експерименту із використанням сучасного прикладного програмного забезпечення.
- ФК 8: Здатність використовувати методи і засоби математичного моделювання для опису фізичних об'єктів та процесів.

## **Програмні результати навчання**

- ПРН 5: Знання основ професійно-орієнтованих дисциплін спеціальності, зокрема, високих фізичних технологій, сучасного матеріалознавства, біофізики та фізики енергетичних систем (залежно від освітньої траєкторії) на рівні, необхідному для успішної роботи в наукових колективах, що працюють в галузі прикладної фізики.
- 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).
- ПРН 11: Вміння знаходити науково-технічну інформацію з різних джерел з використанням сучасних інформаційних технологій.
- ПРН 12: Вміння класифікувати, аналізувати та інтерпретувати науково-технічну, патентну, популярну інформацію в галузі прикладної фізики.
- ПРН 13: Вміння використовувати сучасні методи і технології наукової комунікації українською та іноземною мовами, вміння читати та розуміти фахові англомовні джерела.

## **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 Напівемпіричні методи обчислень.

Тема 4.7 Застосування прикладних програм для квантово-хімічних розрахунків структури молекул.

### Розділ 5. Властивості молекулярних систем.

Тема 5.1 Електричні і магнітні властивості молекул.

Тема 5.2 Теорія функції відгуку та пропагаторні методи.

Тема 5.3 Обчислення властивостей молекул в 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. Слєта Л. О., Іванов В. В. Квантова хімія. — Х. : Фоліо, 2007. — 443 с. — ISBN 978-966-8319-93-8.

### Додаткові

3. Яцимирский К. Б., Яцимирский В. К. Химическая связь. — К. : Вища школа, 1975. — 303 с.
4. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. — 496 с. — ISBN 978-5-9963-0080-8.
5. Szabo A., Ostlund N. S. Modern Quantum Chemistry: Intro to Advanced Electronic Structure Theory. — Dover, 1996. — 481 р.
6. Цюлике Л. Квантовая химия. Т. 1 / под ред. М. В. Базилевский ; пер. немецкий М. М. Беренфельд, Н. П. Гамбарян, И. В. Станкевич. — М. : Мир, 1976. — 656 с.
7. Levine I. N. Quantum Chemistry. — 7th ed. — Pearson, 2014. — 714 p. — ISBN 978-0321803450.

8. 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.
9. Гельман Г. Г. Квантовая химия. — 2-е изд. — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. — 533 с. — ISBN 978-5-94774-768-3.
10. Atkins P. W., Friedman R. Molecular quantum mechanics. — 4th ed. — Oxford University Press, 2005. — 588 p. — ISBN 0-19-927498-3.
11. Sauer S. P. A. Molecular Electromagnetism: A Computational Chemistry Approach. — Oxford University Press, 2011. — 321 с. — ISBN 978-0-19-957539-8.
12. Дмитриев И. С. Электрон глазами химика. — 2-е изд. — Л. : Химия, 1986. — 228 с.

## Програмні продукти

13. Gaussian & GaussView Tutorial Videos. — URL: <https://gaussian.com/videos/>.
14. 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).
15. ORCA Input Library. — URL: <https://sites.google.com/site/orcainputlibrary/>.
16. Multiwfn: program for realizing electronic wavefunction analysis. — URL: <http://sobereva.com/multiwfn/>.
17. Chemcraft: a graphical program for working with quantum chemistry computations. — URL: <http://www.chemcraftprog.com>.

## Online-ресурси

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

## Оглядові наукові статті

21. 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).
22. 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).
23. 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).
24. 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).
25. Liu W. Ideas of relativistic quantum chemistry. — 2010. — DOI: [10.1080/00268971003781571](https://doi.org/10.1080/00268971003781571).
26. 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).
27. Ho M., Hernández-Perez J. M. Evaluation of Gaussian Molecular Integrals. I Overlap Integrals // The Mathematica Journal. — 2012. — Vol. 14.
28. Ho M., Hernández-Perez J. M. Evaluation of Gaussian Molecular Integrals. II. Kinetic-Energy Integrals // The Mathematica Journal. — 2013. — Vol. 15.
29. Ho M., Hernández-Perez J. M. Evaluation of Gaussian Molecular Integrals. III. Nuclear-Electron Attraction Integrals // The Mathematica Journal. — 2014. — Vol. 16.

## 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 програмного забезпечення	Характеристика та призначення
ORCA 6.x	Спеціалізоване програмне забезпечення для квантово-хімічних обчислень, яке використовується в курсі для моделювання молекулярних систем.
Python 3.x (NumPy, Matplotlib, SymPy)	Вільно розповсюджуване середовище програмування.
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>T</sup> E <sub>X</sub>	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.	<b>Рівняння Шредінгера. Кvantovomehanichnyj opis struktury atomu vodnju.</b> 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. <b>Література для опрацювання:</b> [1, Розділ 1], [3, Глава I, II, IV], [4, Глава 3, § 3.1]
Розділ 2. Багатоелектронні атоми	
2.	<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. <b>Література для опрацювання:</b> [1, Розділ 2. §2.2], [3, Глава V], [4, Глава 2]

№	Назва теми лекції та перелік основних питань
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><b>Література для опрацювання:</b> [3, Глава VI], [4, Глава 2, § 2.1, 2.2, 2.3, 2.6]</p>
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 кореляція. Застосування прикладних програм для розрахунків електронної густини та характеристик багатоелектронних атомів.</p> <p><b>Література для опрацювання:</b> [4, Глава 2, § 2.6, 2.7], [13], [16]</p> <p><b>Завдання на СРС:</b> 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><b>Література для опрацювання:</b> [2, Глава 11], [4, 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><b>Література для опрацювання:</b> [4, 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><b>Література для опрацювання:</b> [3, Глава VIII], [4, 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><b>Література для опрацювання:</b> [4, 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. Ієрархія методів розрахунку (діаграма Поппла).</p> <p><b>Література для опрацювання:</b> [4, Глава 3, §§ 3.5, 3.6], <b>Завдання на СРС:</b> Розрахуйте характеристики двоатомних молекул</p>
10.	<p><b>Поняття про метод функціонала електронної густини (DFT-method).</b> Застосування DFT для розрахунку молекул.</p> <p><b>Література для опрацювання:</b> [4, Глава 3, § 3.4]</p>
11.	<p><b>Напівемпіричні методи розрахунку молекул.</b> Ідея нульового диференціального перекриття. Метод Хюкеля.</p> <p><b>Література для опрацювання:</b> [3, Глава XI], [4, Глава 3, § 3.7], [2, Глава 13, §§ 13.2, 13.3]</p>

№	Назва теми лекції та перелік основних питань
12.	<p><b>Застосування прикладних програм для квантово-механічних розрахунків молекул..</b> Застосування комплексу прикладних програм <b>ORCA</b>. Візуалізатори <b>Avogadro</b>. 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><b>Література для опрацювання:</b> [14, 15, 16, 17]</p>
<b>Розділ 5. Властивості молекулярних систем</b>	
13.	<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><b>Література для опрацювання:</b> [2, Глава 11], [4, Глава 4, § 4.1]</p>
14.	<p><b>Пояснення природи хімічного зв'язку в рамках одноелектронної моделі.</b> Молекулярні орбіталі та їх класифікація. Заселеність атомних орбіталь. Геометрична будова багатоатомних молекул. Локалізація і гібридизація орбіталь. Просторовий розподіл електронної густини. Індекси вільної валентності. Дипольні та квадрупольні моменти молекул. Спорідненість до електрона, електронегативність.</p> <p><b>Література для опрацювання:</b> [4, Глава 3, § 3.7], [2, Глава 9]</p>
<b>Розділ 5. Властивості молекулярних систем</b>	
15.	<p><b>Електричні та магнітні властивості.</b> Класичний опис властивостей.</p> <p><b>Література для опрацювання:</b> [11, с. 4.1 – 4.4, 5.1 – 5.4], [10, р. 12]</p>
16.	<p><b>Теорія відгуку.</b> Квантово-механічний опис властивостей в рамках теорії збурення.</p> <p><b>Література для опрацювання:</b> [11, с. 4.5 – 4.6, 5.5 – 5.10, 10], [10, р. 13]</p>
17.	<p><b>Метод зв'язаного збурення</b> в рамках метода Хартрі-Фока для розрахунку властивостей молекул.</p> <p><b>Література для опрацювання:</b> [11, с. 11]</p>
<b>Розділ 6. Конденсовані системи</b>	
18.	<p><b>Невалентні взаємодії в молекулярних системах.</b> Міжмолекулярні взаємодії. Донорно-акцепторні молекулярні комплекси. Водневий зв'язок</p> <p><b>Література для опрацювання:</b> [1, Розділ 6.6 §6.2], [4, Глава 5, §§ 5.1 – 5.3]</p>

## Практичні заняття

№	Назва теми заняття та перелік розглядуваних питань
1.	Розрахунок атома водню в <b>ORCA</b> .
2.	Розрахунок атома гелію в <b>ORCA</b> . Побудова молекулярних орбіталь на основі базису.
3.	Розрахунок атома літію та інших багатоелектронних атомів в <b>ORCA</b> . Побудова молекулярних орбіталь та радіального розподілу густини за допомогою <b>Multiwfn</b> .
4.	Побудова молекулярних систем в програмі <b>Avogadro</b> . Оптимізація структури за допомогою вбудованих методів молекулярної механіки.
5.	Розрахунок енергії основного стану та розподілу густини заряду для двоатомних та багатоатомних молекул.
6.	Розрахунок властивостей багатоатомних молекул.
7.	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 66 години і відводяться наступні види завдань:

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

## **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 заліку.

### **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**

Проміжна атестація студентів (далі — атестація) є календарним контролем. Метою проведення атестації є підвищення якості навчання студентів та моніторинг виконання графіка освітнього процесу студентами<sup>1</sup>.

Термін атестації	Перша атестація 8-й тиждень	Друга атестація 14-й тиждень
Критерій: поточний контроль	$\geq 10$ балів	$\geq 20$ балів

<sup>1</sup>Рейтингові системи оцінювання результатів навчання: Рекомендації до розроблення і застосування. Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. 20 с.

## **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), реферат 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.

### **Домашні контрольні роботи**

Домашні контрольні роботи задаються студентами після кожного практичного і здається на перевірку на останньому практичному заняття.

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 заліку

В таблиці наведені умови допуску до семестрового контролю.

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

Додаткові умови допуску до заліку, які заохочуються:

- Залучення при виконанні реферату 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 (залік)

Питання, що виносяться на залік складаються із 2-х теоретичних питань, за кожне з яких дається 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 залік 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	Залік	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
$60 \leq R < 65$ $R < 60$	незадовільно
Не здані ДКР	не допущено

## 9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Перелік питань, які виносяться на залік

1. Порівняйте опис атома водню в моделі Бора й у квантовій механіці.
2. Квантовомеханічний опис структури атома та його спектрів. Рівняння Шредінгера.
3. Рівняння Шредінгера для Атома водню. Фізичний смисл квантових чисел. Залежність радіальної складової хвильової функції від відстані між ядром і електроном при різних квантових числах. Атомна система одиниць.
4. Атом водню в квантовій механіці. Аналіз кутової складової. s-, p-, d-атомні орбіталі. Повні хвильові функції атома водню.
5. Квантовомеханічний опис атома водню. Спін електрона.
6. Приведіть визначення атомної орбіталі. Як позначають атомні орбіталі?
7. Квантовомеханічна багаточасткова проблема в контексті електронної структури багатоелектронного атому.
8. Атом гелію. Ортогелій, парагелій. Основи квантово-механічної теорії збурень. Застосування теорії збурень до атома гелія. Основний стан атома гелію.
9. Утруднення точного опису двоелектронного атому. Теорія збурень, варіаційний принцип.
10. Які переваги варіаційного методу? У яких задачах застосовується теорія збурень?
11. Запишіть рівняння для знаходження варіаційних коефіцієнтів, якщо пробна функція подається у вигляді лінійної комбінації двох базисних функцій.
12. Запишіть рівняння нульового і першого порядків для знаходження перших поправок у теорії збурень. Одержані вираз для першої поправки до енергії.
13. Складіть детермінанти Слейтера для основного і збудженого станів атома гелію. Як розрізняються хвильові функції синглетнош і триплетного станів?
14. Яка послідовність розрахунків за методом самоузгодженого поля? Коли припиняється ітераційна процедура?
15. Сформулюйте правила заповнення АО електронами (принцип найменшої енергії, принцип Паулі, правило Хунда).
16. Предмет квантової механіки і квантової хімії. Основні етапи розвитку квантової теорії. Головні тенденції в розвитку квантової хімії. Сучасні можливості і застосування при вирішенні хімічних задач.
17. Метод самоузгодженого поля та його застосування до атома гелія. Рівняння Хартрі та їх зв'язок з варіаційним принципом.
18. Метод Хартрі-Фока розрахунку електронної структури багатоелектронного атому.
19. Застосування комп'ютерних програм для квантово-хімічних розрахунків властивостей багатоелектронних атомів методом Хартрі-Фока. Функції Слейтера. Порівняння результатів хартрі-фоковських розрахунків атомів з експериментом.
20. Принцип Паулі. Періодична система елементів. Векторна модель атома. Терми. Спін-орбітальна взаємодія.
21. Який вигляд має повна хвильова функція молекулярної системи в адіабатичному наближенні? Запишіть молекулярне, електронне і ядерне рівняння для системи, що містить N електронів і M ядер.

22. Хімічний зв'язок в в йонних сполуках. Двоатомні іонні молекули. Спорідненість до електрона. Електронегативність.
23. Утворення молекул з йонів. Потенціали іонізації атомів та йонів. Зміна потенціалів іонізації в групі та за періодом.
24. Молекула водню. Метод Гайтлера-Лондона. Метод валентного зв'язку. Порівняння результатів розрахунків  $H_2$  методом Гайтлера-Лондона з експериментом. Валентність.
25. Квантова механіка утворення молекули водню. Хвильові функції молекули водню. Суть методу валентних зв'язків.
26. Метод молекулярних орбіталей. Молекулярний іон водню  $H_2^+$ . Розрахунок двоатомних молекул в наближенні лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО). Рівняння Рутана.
27. Молекулярні орбіталі для гомоядерних молекул. Двоатомні молекули другого періоду в методі MO ЛКАО.
28. Розрахунок геометрії хімічного зв'язку методом валентних зв'язків.
29. Порівняйте опис хімічного зв'язку в молекулі  $H_2$  у методах MO і ВС. У якому з них коректно описується процес дисоціації?
30. Застосування комп'ютерних програм для квантово-хімічних розрахунків властивостей двоатомних молекул методом Хартрі-Фока. Мінімальний базис.
31. Напівемпіричні методи розрахунку молекул в рамках MO ЛКАО. Ідея нульового диференціального перекриття.
32. Викладіть основні положення методу MO ЛКАО. Чи є він точним методом? Назвіть джерела помилок методу. Наведіть обґрунтування методу.
33. Охарактеризуйте наближення MO ЛКАО. Наведіть приклади базисних функцій. Що означають терміти валентний базис, мінімальний базис, розширений базис.
34. Які орбіталі називають орбіталями слейтерівського типу?
35. Які квантово-хімічні методи називаються неемпіричними («ab initio»), напівемпіричними? Що означає термін «ab initio»?
36. Поняття про теорію функціоналу електронної густини.
37. Класифікація конденсованих систем за типами хімічного зв'язку. Хімічний зв'язок в іонних сполуках. Молекулярні конденсовані системи. Водневий зв'язок. Ковалентний зв'язок в твердих тілах. Металічні кристали.

**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 № \_\_\_\_\_ 6 від 11 червня 2024 р.)  
(повна назва кафедри)

**Затверджено:** Метод. комісією \_\_\_\_\_ НН ФТІ (протокол № \_\_\_\_\_ 6 від 27 червня 2024 р.)  
(назва інституту)