



КВАНТОВА ХІМІЯ І КВАНТОВО-МЕХАНІЧНІ МЕТОДИ ОБЧИСЛЕННЯ (ПО 1)

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: (5 кр.) 150 год. Лекційних занять: 36 год. Практичних занять: 36 год. Самостійна робота студентів: 78 год.
Семестровий контроль / контрольні заходи	екзамен, поточний контроль, модульна контрольна робота, домашня контрольна робота
Розклад занять	http://ipt.kpi.ua/navchalnij-protses
Мова викладання	Українська
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: доцент, к.ф.-м.н., доцент Пономаренко Сергій Миколайович (s.ponomarenko@kpi.ua).
Розміщення курсу	https://classroom.google.com/c/MjIONzY1NTA50TMy?cjc=ozzj pz7

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 наукоємних 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 успішного засвоєння курсу «Квантова хімія і квантово-механічні методи обчислення» студент повинен володіти базовими поняттями та термінологією низки суміжних дисциплін. Зокрема, необхідні знання основ програмування, загальної та фізичної хімії, чисельних і обчислювальних методів, атомної фізики, квантової механіки, статистичної фізики, а також фізики твердого тіла. Саме ці галузі формують теоретичний і обчислювальний фундамент курсу.

Пререквізити курсу:

1. Комп'ютерне моделювання та симуляції в фізиці;
2. Фізика суцільних середовищ.

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

Постреквізитами дисципліни є наступні:

- Нові речовини і матеріали для наукоємних технологій.

Знання та практичні навички, набуті під час вивчення навчальної дисципліни «Квантова хімія і квантово-механічні методи обчислення», є необхідною теоретичною та методологічною основою для успішного опанування постреквізитної навчальної дисципліни, а також для виконання магістерської дисертації та проходження науково-дослідної практики.

3. Зміст навчальної дисципліни

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

Тема 1.1 Історія виникнення квантової хімії та квантово-механічних розрахунків. Сучасні досягнення та перспективи розвитку галузі.

Тема 1.2 Рівняння Шредінгера. Квантово-механічний опис структури атома водню та його спектрів.

Розділ 2. Ab Initio методи квантово-механічних обчислень

Тема 2.1 Проблеми квантової механіки систем багатьох частинок.

Тема 2.2 Рівняння Хартрі-Фока в базисному представленні (Рівняння Хартрі-Фока-Рутаана).

Тема 2.3 Наближення Борна-Оппенгеймера.

Тема 2.4 Методи молекулярної механіки.

Тема 2.5 Модельні молекулярні системи та природа хімічного зв'язку.

Тема 2.6 Пост-Хартрі-Фоківські методи.

Тема 2.7 Поняття про метод функціонала густини (DFT).

Розділ 3. Властивості молекул.

Тема 3.1 Молекулярні властивості як похідні енергії.

Тема 3.2 Коливальні властивості молекул.

Тема 3.3 Збуджені стани та UV/VIS спектроскопія.

Тема 3.4 Магнітні властивості молекул.

4. Навчальні матеріали та ресурси

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

Основні

1. В.К. Яцимирський та А.В. Яцимирський. Квантова хімія. К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. 479 с. ISBN: 978-966-439-160-0.
2. Л. О. Слета та В. В. Іванов. Квантова хімія. Х.: Фоліо, 2007. 443 с. ISBN: 978-966-8319-93-8.
3. П. Є. Стрижак. Квантова хімія : підручник. Київ: Києво-Могилянська академія, 2009. 457 с.

Додаткові

4. П. М. Таланчук, В. В. Малишев та О. С. Мороз. Квантово-механічна редакція періодичної таблиці елементів Д. І. Менделєєва : повне доведення та обґрунтування. Київ: НТУУ "КПІ", 2012. 14 с.
5. Ira. N. Levine. Quantum Chemistry. 7th ed. Pearson, 2014. 714 pp. ISBN: 978-0321803450.
6. S. M. Blinder and J. E. House, eds. Mathematical Physics in Theoretical Chemistry. Developments in Physical & Theoretical Chemistry. Elsevier, 2019. 412 pp. ISBN: 978-0-12-813651-5.
7. P. W. Atkins and R Friedman. Molecular quantum mechanics. 4th ed. Oxford University Press, 2005. 588 pp. ISBN: 0-19-927498-3.
8. Stephan P. A. Sauer. [Molecular Electromagnetism: A Computational Chemistry Approach](#). Oxford University Press, 2011. 321 с. ISBN: 978-0-19-957539-8.
9. В. В. Нечипорук, А. О. Федоров та І. В. Берлади. Квантова механіка та квантова хімія : навчальний посібник до практичних занять для студентів хімічного факультету. Чернівці: Рута, 2005. 76 с.

Програмні продукти

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

Online-ресурси

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

Оглядові наукові статті

19. Qiming Sun et al. "PySCF: the Python-based simulations of chemistry framework". In: *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science* 8.1 (2018), e1340. DOI: [10.1002/wcms.1340](https://doi.org/10.1002/wcms.1340).
20. Qiming Sun et al. "Recent developments in the PySCF program package". In: *Journal of Chemical Physics* 153.2 (2020), p. 024109. DOI: [10.1063/5.0006074](https://doi.org/10.1063/5.0006074).
21. F. Neese, F. Wennmohs, U. Becker, and C. Riplinger. "The ORCA quantum chemistry program package". In: *J. Chem. Phys.* 152 (22 2020). DOI: [10.1063/5.0004608](https://doi.org/10.1063/5.0004608).
22. Yudong Cao et al. "Quantum Chemistry in the Age of Quantum Computing". In: *Chemical Reviews* 119 (19 2019). ISSN: 15206890. DOI: [10.1021/acs.chemrev.8b00803](https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00803).
23. Pavlo O. Dral. "Quantum Chemistry in the Age of Machine Learning". In: *Journal of Physical Chemistry Letters* 11 (6 2020). ISSN: 19487185. DOI: [10.1021/acs.jpcllett.9b03664](https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.9b03664).
24. Sam McArdle, Suguru Endo, Alán Aspuru-Guzik, Simon C. Benjamin, and Xiao Yuan. "Quantum computational chemistry". In: *Reviews of Modern Physics* 92 (1 2020). ISSN: 15390756. DOI: [10.1103/RevModPhys.92.015003](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.92.015003).
25. Wenjian Liu. Ideas of relativistic quantum chemistry. 2010. DOI: [10.1080/00268971003781571](https://doi.org/10.1080/00268971003781571).

26. Moritz P. Haag та Markus Reiher. "Real-time quantum chemistry". В: *International Journal of Quantum Chemistry* 113 (1 2013). ISSN: 00207608. DOI: [10.1002/qua.24336](https://doi.org/10.1002/qua.24336).
27. Minhuy Ho and Julio Manuel Hernández-Perez. "Evaluation of Gaussian Molecular Integrals. I Overlap Integrals". In: *The Mathematica Journal* 14 (2012).
28. Minhuy Ho and Julio Manuel Hernández-Perez. "Evaluation of Gaussian Molecular Integrals. II. Kinetic Energy Integrals". In: *The Mathematica Journal* 15 (2013).
29. Minhuy Ho and Julio Manuel Hernández-Perez. "Evaluation of Gaussian Molecular Integrals. III. Nuclear-Electron Attraction Integrals". In: *The Mathematica Journal* 16 (2014).

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 пояснювально-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, висувачи 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 розповсюджене середовище програмування. NumPy -бібліотека використовується для розрахунків. Matplotlib -бібліотека — для побудови графіків. SymPy -бібліотека — для символічної 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 ліцензією Apache-2.0.
Multiwfn	Програма для проведення аналізу електронних хвильових функцій. Вона безкоштовна, з відкритим вихідним кодом, високоефективна, 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
L^AT_EX	Система верстки для підготовки наукових звітів. Використовується студентами для оформлення звітів, розрахунково-графічних робіт з формулами та графіками.

№	Назва теми лекції та перелік основних питань	Год.
Розділ 1. Предмет, методи, гіпотези та моделі квантової хімії		
1.	Історія виникнення квантової хімії та квантово-механічних розрахунків. Об'єкт, предмет дослідження квантової хімії. Сучасні досягнення та перспективи розвитку галузі.	2
2.	Рівняння Шредінгера. Квантовомеханічний опис структури атома водню. Стани електрона в атомі водню та квантові числа. Пояснення спектрів.	2
Розділ 2. Ab Initio методи методи квантово-механічних обчислень		
3.	Проблеми квантової механіки систем багатьох частинок. Спін електрона. Принцип Паулі. Застосування теорії збурень та варіаційного принципу для розрахунку енергії основного стану атома гелію. Ортогелій, парагелій. Метод самоузгодженого поля (метод Хартрі) та метод Хартрі-Фока для розрахунку електронної структури багатоелектронного атому. Детермінант Слейтера. Поняття мультиплетності. Атомні електронні конфігурації і терми.	4
4.	Рівняння Хартрі-Фока в базисному представленні (Рівняння Хартрі-Фока-Рутаана). Орбіталі слейтерівського типу (STO). Базисні набори. Варіанти методу Хартрі-Фока. Спінове забруднення в методі UHF. Енергія, орбіталі та електронна густина. Теорема Купманса. Трактуювання розв'язків одноелектронної моделі з точки зору хімії.	4
5.	Наближення Борна-Оппенгеймера. Відокремлення електронного та ядерного руху. Поняття потенціальної енергетичної поверхні та молекулярної структури як стаціонарної точки на ПЕП. Межі застосовності наближення.	2
6.	Методи молекулярної механіки. Силіовий та енергетичний аспекти опису хімічного зв'язку. Внутрішні координати молекули. Внутрішні координати молекули (довжини зв'язків, валентні кути, двогранні кути). Форми потенціалів. Параметризація силіових полів. Переваги та обмеження молекулярної механіки порівняно з квантово-механічними методами. Практичне знайомство з програмами молекулярного моделювання. Avogadro як універсальний молекулярний редактор і візуалізатор.	2
7.	Моделі молекулярні системи та природа хімічного зв'язку. Метод молекулярних орбіталей у наближенні лінійної комбінації атомних орбіталей (МО ЛКАО). Побудова та аналіз кривих потенціальної енергії для двоатомних молекул (H_2^+ , H_2 , гетероядерні молекули). Пояснення природи ковалентного, іонного та металічного зв'язку на основі МО-картини. Симетрія молекулярних орбіталей, зв'язуючі та розпушуючі МО. Дипольний момент молекули: визначення, розрахунок у МО ЛКАО, зв'язок з розподілом електронної густини та електронегативністю.	4
8.	Пост-Хартрі-Фоківські методи. Електронна кореляція: визначення, динамічна та статична кореляція, енергія кореляції. Теорія збурень Меллера-Плессета (MP2, MP3, MP4). Метод конфігураційної взаємодії (CI): повна CI (FCI), CISD, CISDTQ. Метод зв'язаних кластерів (CC): CCS, CCSD, CCSD(T), CCSDT. Метод багатоконфігураційного самопогодженого поля (MCSCF) і повного активного простору (CASSCF, NEVPT2). Порівняння точності та обчислювальної вартості пост-ХФ методів.	4
9.	Поняття про метод функціонала густини (DFT). Теорема Хоенберга-Кона. Рівняння Кона-Шема. Драбина Якова. Практичне застосування DFT-методів у обчисленнях: переваги, обмеження, типові помилки та сфери надійного використання.	2

№	Назва теми лекції та перелік основних питань	Год.
Розділ 3. Властивості молекул		
10.	Молекулярні властивості як похідні енергії. Аналітичні та чисельні похідні. Електричні властивості нульового, першого та другого порядку: дипольний момент, статична та частотно-залежна поляризованість, перша та друга гіперполяризованість. Аналітичні перші похідні (градієнт енергії — оптимізація геометрії) та другі похідні (ядерний гессіан — коливальні частоти). Чисельне диференціювання для властивостей вищих порядків. Вплив методу та базисного набору на точність.	4
11.	Коливальні властивості молекул. Інфрачервона та Раман-спектроскопія. Термодинаміка. Гармонічне та анагармонічне (VPT2) обчислення коливальних частот і нормальних мод. Перехідний дипольний момент та інтенсивності ІЧ-поглинання, активність Раман. Нульова енергія коливань (ZPE), термокорекції, ентальпія, ентропія та вільна енергія Гіббса в наближенні жорсткий ротор–гармонічний осцилятор. Стандартні ентальпії утворення та енергії реакцій. Масштабування частот. Візуалізація нормальних коливань.	2
12.	Збуджені електронні стани та UV/Vis-спектроскопія. Люмінесценція. Вертикальні та адіабатичні електронні переходи методами TD-DFT, CIS, EOM-CCSD. Принцип Франка–Кондона, вібраційна структура смуг. Побудова теоретичних UV/Vis-спектрів.	2
13.	Магнітні властивості молекул. ЯМР- та ЕПР-спектроскопія. ЯМР: розрахунок хімічних зсувів ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P та констант спин-спінової взаємодії J методом GIAO (HF, DFT, MP2). Вплив функціоналу, базису. ЕПР: g -тензор та тензор надтонкої взаємодії для відкритооболонкових систем. Порівняння теоретичних та експериментальних спектрів.	2

Практичні заняття

№	Назва теми заняття та перелік розглядуваних питань	Год.
1.	Основи роботи в програмах для квантово-механічних обчислень. Встановлення та налаштування. Огляд основних пакетів (Gaussian, ORCA, PySCF). Встановлення та налаштування, створення віртуальних середовищ. Робота з Avogadro. Формати вхідних та вихідних файлів. Запуск перших тестових розрахунків, паралелізація.	2
2.	Розрахунок атома водню в Python/SymPy та Python/PySCF. Символьне розв'язання рівняння Шредінгера для атома водню в SymPy. Числовий Hartree–Fock розрахунок в PySCF: вибір базису, побудова інтегралів, отримання енергії та орбіталей. Візуалізація радіальних хвильових функцій та 1s-орбіталі. Порівняння з точним аналітичним розв'язком.	2
3.	Розрахунок атома гелію. Побудова молекулярних орбіталей на основі базису. Hartree–Fock розрахунок атома гелію в мінімальних та розширених базисах. Оцінка енергії електронної кореляції. Формування МО у наближенні ЛКАО. Експорт та візуалізація орбіталей (cube-файли). Порівняння розрахункової енергії іонізації з експериментом.	4
4.	Розрахунок атома літію та інших багатоелектронних атомів. Побудова радіального розподілу електронної густини. Розрахунок атомів з відкритими оболонками (ROHF/UHF). Аналіз заповнення орбіталей, спінової густини та мультиплетності. Робота в Multiwfn та Avogadro: побудова радіального розподілу електронної густини, візуалізація орбіталей, обчислення моментів густини.	4

№	Назва теми заняття та перелік розглядуваних питань	Год.
5.	Побудова молекулярних систем в програмі Avogadro. Оптимізація структури за допомогою вбудованих методів молекулярної механіки. Інтерактивна побудова молекул. Використання інструментів малювання, вставки фрагментів, автододавання воднів. Оптимізація геометрії силовими полями MMFF94, UFF, Ghemical. Вимірювання геометричних параметрів. Підготовка та експорт структур для квантово-хімічних розрахунків.	4
6.	Розрахунок енергії основного стану для двоатомних молекул. Оптимізація геометрії квантово-хімічними методами. Оптимізація рівноважної геометрії та обчислення енергії зв'язування для H_2 , N_2 , CO , HF , O_2 тощо. Використання методу Хартрі-Фока та базисів 6-31G*, cc-pVDZ, def2-TZVP. Побудова кривої потенціальної енергії (PES scan). Порівняння розрахункових довжин зв'язків та силових сталих з експериментом.	4
7.	Пост-Хартрі-Фоківські методи. Розрахунки методами CI, CC та DFT. Порівняння енергій основного стану методами CISD, CCSD, CCSD(T), MP2 та DFT. Оцінка внеску електронної кореляції. Практичні розрахунки для малих молекул (H_2O , CH_4 , N_2). Вибір кореляційно-узгоджених базисів (cc-pVTZ, aug-cc-pVTZ). Аналіз обчислювальної складності та точності.	4
8.	Молекулярні властивості, коливальні спектри та термохімія. Обчислення дипольного моменту, поляризованості, гіперполяризованості. Аналітичні (градієнт, гесіан) та чисельні похідні. Гармонічні та анагармонічні ІЧ/Раман-спектри, інтенсивності, нормальні моди. ZPE, термокорекції, ентальпія, ентропія, вільна енергія Гіббса, стандартні ентальпії утворення. Масштабування частот, порівняння з експериментом. Візуалізація в Avogadro/Multiwfn.	4
9.	Електронні спектри поглинання та випромінювання (UV/Vis). Розрахунок вертикальних переходів методами TD-DFT (B3LYP, CAM-B3LYP, ω B97X-D, M06-2X), CIS, EOM-CCSD. Фактори Франка-Кондона, вібраційна структура. Побудова та порівняння теоретичних UV/Vis-спектрів з експериментом.	4
10.	ЯМР-спектри та магнітні властивості. Хімічні зсуви та константи спин-спінової взаємодії. Розрахунок хімічних зсувів 1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P та констант спин-спінової взаємодії J методом GIAO (HF, B3LYP, PBE0, KT3, mPW1PW91). Вплив функціоналу, базису й розчинника. Побудова теоретичних ЯМР-спектрів та порівняння з експериментальними даними.	4

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, сформувані 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 78 години і відводяться наступні види завдань:

№	Види самостійної роботи	Годин
1.	обробка і осмислення інформації, отриманої безпосередньо на лекціях, робота з відповідними підручниками та особистим конспектом лекцій	18
2.	виконання підготовчої роботи до написання МКР	10
3.	робота з відповідними програмними продуктами та виконання ДКР	20
4.	підготовка до складання семестрового контролю	30
Всього годин самостійної роботи		78

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.

Визнання результатів навчання, набутих у неформальній/інформальній освіті

Порядок визнання таких результатів регламентується Положенням про визнання результатів навчання, набутих у неформальній / інформальній освіті (<https://osvita.kpi.ua/index.php/node/179>). Можуть бути зараховані окремі змістовні модулі або теми дисципліни. В такому разі здобувач звільняється від виконання відповідних завдань, отримуючи за них максимальний бал відповідно до рейтингової системи оцінювання.

Політика щодо академічної доброчесності

Обов'язковою умовою виконання завдань з освітньої компоненти є дотримання політики та принципів академічної доброчесності (<https://kpi.ua/academic-integrity>), які, у тому числі, викладено у Кодексі честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» (<https://kpi.ua/code>), Положенні про систему запобігання академічному плагіату в КПІ ім. Ігоря Сікорського (<https://osvita.kpi.ua/node/47>). У разі виявлення дублювання робіт, плагіату роботи здобувачі отримують нульовий рейтинг.

Політика використання штучного інтелекту

Використання штучного інтелекту (далі, ШІ) регламентується «Політикою використання штучного інтелекту для академічної діяльності в КПІ ім. Ігоря Сікорського» (<https://osvita.kpi.ua/node/1225>). Усі навчальні завдання з дисципліни мають бути результатом власної оригінальної роботи здобувача.

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 (PCO)

Видами контролю успішності засвоєння матеріалу дисципліни є оцінка за модульну контрольну роботу (МКР), домашню контрольну роботу (ДКР) та семестровий контроль.

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 20 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 40 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	≥ 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 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 екзамен і після співбесіди зі студентом.

№	Контрольний захід	Бал
1	Модульна контрольна робота	20
2	Домашня контрольна робота	40
3	Екзамен	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, МКР	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 № _____ 6 _____ від _____ 11 червня 2024 р.)
(повна назва кафедри)

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