



## Комп'ютерна хімія

### Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

#### Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Другий (магістерський)</i>
Галузь знань	<i>16 Хімічна та біоінженерія</i>
Спеціальність	<i>161 Хімічні технології та інженерія</i>
Освітня програма	<i>Хімічні технології косметичних засобів та харчових добавок</i>
Статус дисципліни	<i>Нормативна</i>
Форма навчання	<i>очна(денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>2 курс, осінній</i>
Обсяг дисципліни	<i>7,5 кредитів</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Екзамен письмовий</i>
Розклад занять	<i>Лекція 2 години на тиждень (1 пара), практичні заняття 2 години через 2 тижня (1 пара), лабораторні роботи 4 години через тиждень (2 пари) за розкладом на rozklad.kpi.ua</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: <i>док. техн. наук, професор, Чигиринець Олена Едуардівна, corrosionlife@gmail.com</i> Практичні: <i>док. техн. наук, професор, Чигиринець Олена Едуардівна, corrosionlife@gmail.com</i> Лабораторні: <i>док. техн. наук, професор, Чигиринець Олена Едуардівна, corrosionlife@gmail.com</i>
Розміщення курсу	<i>Moodle ( платформа Sikorsky-distance,); доступ за запрошенням викладача</i>

#### Програма навчальної дисципліни

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

*Дисципліна «Комп'ютерна хімія» допомагає студентам на другому курсі познайомитися з методами квантово-хімічних розрахунків, які дозволять більш глибоко зрозуміти та пояснити механізми хімічних реакції на основі вивчення будови молекул хімічних речовин та вплив їх квантово-хімічних дескрипторів на її фізико-хімічні властивості. .*

##### **Предмет дисципліни**

**Метою** дисципліни є формування у студентів здатностей:

- *застосовувати математичний апарат та спеціалізовані комп'ютерні програми для створення та синтезу нових добавок для косметичних засобів та харчових технологій з регульованими властивостями (ФК 1, ФК 4)*
- *встановлювати і на основі квантово-хімічних розрахунків прогнозувати стан і поведінку створених об'єктів хімічної технології харчових добавок та косметичних засобів у змінних умовах їхнього існування та функціонування (ФК 1, ФК 4).*

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

**ЗНАННЯ:**

- можливостей комп'ютерної реалізації задач молекулярного моделювання
- теоретичних методів, якими вивчають будову хімічної речовини, зокрема електронну будову атомів та молекул, фізичних законів, які застосовуються у теорії будови речовини;
- основних понять та законів квантової механіки та квантової хімії
- області застосування різних методів та підходів в квантово-хімічних розрахунках
- принципів проведення молекулярного моделювання

**УМІННЯ:**

- проведення просторової візуалізації органічних молекул та квантово-хімічних розрахунків їх параметрів з використанням програмних пакетів ChemOffice та HyperChem 8.0
- творчо підходити до вибору методу квантово-хімічного розрахунку
- розраховувати просторову електронну будову молекул біологічно активних речовин та різних молекулярних систем, оцінювати їх енергетичні та спектральні характеристики
- проводити квантово-хімічні розрахунки та інтерпретувати їх результати,
- прогнозувати реакційну здатність органічних сполук,
- розраховувати теплові ефекти органічних реакцій, вплив температури та сольватування

**ДОСВІД:**

- використання знань, методів та основних програмних засобів при проведенні досліджень механізмів реакцій, взаємодій, фізико-хімічних процесів та синтезу складових косметичних та парфумерних засобів, а також харчових добавок.
- практичних навичок в інтерпретації результатів розрахунку електронної будови, енергетичних та спектральних характеристик молекул та молекулярних структур.

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

Перелік дисциплін, знань та умінь, володіння якими необхідні студенту для успішного засвоєння дисципліни:

Загальна та неорганічна хімія	Основні класи неорганічних речовин, їх фізико-хімічні властивості. Будова атомів речовин. Залежність хімічної активності речовин в залежності від положення в таблиці Менделєєва та будови атомів.
Органічна хімія	Основні класи органічних речовин та їх фізико-хімічні властивості
Хімічна технологія косметичних засобів	Основні сировинні складові для створення косметичних засобів. Їх хімічні та фізико-хімічні властивості
«Хімічна технологія харчових добавок»	Основні сировинні складові для створення харчових добавок. Класифікація харчових добавок

### **3. Зміст навчальної дисципліни**

#### **Розділ 1 ЗАГАЛЬНА КВАНТОВА ХІМІЯ**

##### *Тема 1.1 Предмет комп'ютерної хімії*

*Вступ . Предмет, мета і завдання дисципліни «Комп'ютерна хімія». Сучасні методи комп'ютерної хімії. Програми, що реалізують сучасні методи комп'ютерної хімії. Одиниці вимірювань у комп'ютерній хімії.*

##### *Тема 1.2 Електронна будова атомів*

*Квантово-хімічна модель будови атома гідрогену. Квантові числа та енергетичні стани атома. Принцип Паулі. Електронна будова елементів Періодичної системи. Електронна будова і біогенні властивості елементів*

##### *Тема 1. 3 Основні положення квантової хімії*

*Експериментальні основи квантової теорії. Модель атома водню в наближенні Бора – Зоммерфельда. Рівняння Шредінгера. Приклади розв'язку рівняння Шредінгера. Співвідношення невизначеності. Основні постулати квантової теорії.*

##### *Тема 1.4 Основні наближення квантової хімії*

*Наближення Борна –Оппенгеймера. Самоузгоджене поле Хартрі –Фока. Метод варіацій. Метод збурень. Метод валентних зв'язків. Метод молекулярних орбіталей. Спрямованість хімічного зв'язку та еквівалентні орбіталі.*

##### *Тема 1.5 Обчислювальні методи квантової хімії*

*Узагальнений підхід, метод ab-initio. Електронна конфігурація і взаємодія конфігурацій. Напівемпіричні і емпіричні методи. Базис розрахунків. Наближення функціонала густини; дослідження властивостей біологічно активних сполук.*

##### *Тема 1.6 Візуалізація просторової структури молекул*

*Знайомство з програмним пакетом ChemOffice. Запис схеми реакції із зазначенням реакційних центрів. Візуалізація просторової структури молекул. Визначення геометричних параметрів молекулярної моделі. Оптимізація геометрії молекулярної структури Особливості різних алгоритмів оптимізації програми HyperChem.*

#### **Розділ 2 КВАНТОВО-ХІМІЧНА ОЦІНКА ВЛАСТИВОСТЕЙ БІОСИСТЕМ**

*Тема 2.1 Просторова будова і властивості біомолекул. Динамічні моделі біомолекул. Особливості методу молекулярної механіки. Силоне поле молекулярної механіки.*

*Тема 2.2 Комп'ютерні моделі. Розрахункові методи прогнозу біологічної активності органічних сполук*

*Регресивні моделі біологічної активності. Метод найменших квадратів. Емпіричні константи заступників. Рівняння Гаммета і Тафта. Аддитивна модель Фрі-Вільсона. Метод Хенча. Оцінка ліпофільності..*

*Тема 2.3. Вивчення реакційної здатності органічних сполук в газовій фазі*

*Обчислення геометрії органічних сполук. Розрахунок потенціалів іонізації. Розрахунок індексів реакційної здатності, обчислення теплот утворення. Розрахунок теплових*

ефектів органічних реакцій. Розрахунок поверхонь потенційної енергії і перехідних станів. Розрахунки для систем з водневими зв'язками.

Тема 2.4 Врахування сольватації в квантово-хімічних розрахунках

Класифікація моделей. Сольватонна модель. Модель Гартрі поля реакції. Наближення супермолекули. Метод атом-атомних потенціалів. Модель точкових диполів. Вивчення механізмів органічних реакцій в розчинах методами квантової хімії.

Тема 2.5 Квантово-хімічні розрахунки в молекулярній спектроскопії

Силові постійні хімічних зв'язків і частоти внутрішньомолекулярних коливань. Інтенсивність смуг поглинання в ІЧ-спектрах. Методи розрахунку будови молекул в електронно-збуджених станах. Квантово-хімічні розрахунки частот і ймовірностей електронних переходів. Дослідження збуджених станів органічних сполук. Інтенсивність компонент електронно-коливальних переходів. Обчислення інтенсивності ліній в спектрах комбінаційного розсіювання світла.

## Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету, у вільному доступі в інтернеті, в методичному кабінеті кафедри. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

### Базова:

1. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. — 4-те вид., доп. — Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. — 872с.
2. Барановский В. И. Б Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений / В. И. Барановский. - М. : Издательский центр «Академия», 2008. - 384 с.

### Додаткова

3. Основи комп'ютерної хімії біологічно активних речовин: конспект лекцій для студентів спеціальності 8.05170109 «Технології харчових продуктів оздоровчого та профілактичного призначення» денної форми навчання/ Укладачі : Н.О. Стеценко, Л.С. Дегтярьов, Н.Е. Фролова, В.Д. Іванова. –К. : НУХТ, 2012. – 87 с

### Інформаційні ресурси

4. Дистанційний курс Moodle, платформа Sikorsky-distance. Режим доступу: <https://do.ipu.kpi.ua/course/view.php?id=1956>

## Навчальний контент

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

5. Вичитування лекцій з дисципліни проводиться паралельно з виконанням студентами лабораторного практикуму та розглядом питань, що виносяться на практичні заняття та самостійну роботу. При читанні лекцій застосовуються засоби для відеоконференцій (Google Meet, Zoom тощо) та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені на платформі Sikorsky-distance [4]. Після кожної лекції

рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

№	Дата	Опис заняття
1	1 - 3 вересня 2021 р.	<b>Розділ 1 ЗАГАЛЬНА КВАНТОВА ХІМІЯ</b> Тема 1.1. Предмет комп'ютерної хімії Вступ . Предмет, мета і завдання дисципліни «Комп'ютерна хімія». Сучасні методи комп'ютерної хімії. Програми, що реалізують сучасні методи комп'ютерної хімії. Одиниці вимірювань у комп'ютерній хімії.
2	6 – 10 вересня 2021 р.	Тема 1.2– Квантово-хімічна модель будови атома гідрогену. Електронна будова елементів Періодичної системи. Квантові числа та енергетичні стани атома. Принцип Паулі. Електронна будова і біогенні властивості елементів
3	13 - 217 вересня 2021 р.	Тема 1.3 – Експериментальні основи квантової теорії. Модель атома водню в наближенні Бора – Зоммерфельда
4	20 - 24 вересня 2021 р.	Продовження теми 1.3 Рівняння Шредінгера. Приклади розв'язку рівняння Шредінгера. Співвідношення невизначеності. Основні постулати квантової теорії
5	27 вересня - 1 жовтня 2021 р.	Тема 1.4 – Наближення Борна – Оппенгеймера. Самоузгоджене поле Хартрі –Фока. Метод варіацій. Метод збурень. Метод валентних зв'язків. Метод молекулярних орбіталей. Спрямованість хімічного зв'язку та еквівалентні орбіталі.
6	4 - 8 жовтня 2021 р.	Тема 1.5: Узагальнений підхід, метод <i>ab-initio</i> . Електронна конфігурація і взаємодія конфігурацій. Напівемпіричні і емпіричні методи. Базис розрахунків
7	11 - 15 жовтня 2021 р.	Продовження теми 1.5 Наближення функціонала густини; дослідження властивостей біологічно активних сполук с
8	18 – 22 жовтня 2021 р.	Тема 1.6: Знайомство з програмним пакетом ChemOffice. Запис схеми реакції із зазначенням реакційних центрів. Візуалізація просторової структури молекул. Визначення геометричних параметрів молекулярної моделі. Оптимізація геометрії молекулярної структури Особливості різних алгоритмів оптимізації програми HyperChem.
9	25-29 жовтня 2021 р.	<b>Розділ 2 КВАНТОВО-ХІМІЧНА ОЦІНКА ВЛАСТИВОСТЕЙ БІОСИСТЕМ</b> Тема 2.1 : Особливості методу молекулярної механіки. Силоче поле молекулярної механіки.
10	1 - 5 листопада 2021 р.	Теми 2.2: Регресивні моделі біологічної активності. Метод найменших квадратів. Емпіричні константи заступників. Рівняння Гаммета і Тафта
11	8 - 12 листопада 2021 р.	Продовження теми 2.2 : Аддитивна модель Фрі-Вільсона. Метод Хенча. Оцінка ліпофільності.
12	15 – 19 листопада 2021 р.	Тема 2.3 Обчислення геометрії органічних сполук. Розрахунок потенціалів іонізації. Розрахунок індексів реакційної здатності, обчислення теплот утворення

13	22 – 29 листопада 2021 р.	Продовження теми 2.3: Розрахунок теплових ефектів органічних реакцій. Розрахунок поверхонь потенційної енергії і перехідних станів
14	29 листопада – 3 грудня 2021 р.	Продовження теми 2.3 : Розрахунки для систем з водневими зв'язками.
15	6 – 10 грудня 2021 р.	Тема 2.4: Класифікація моделей. Сольватонна модель. Модель Гартрі поля реакції.
16	13 – 17 грудня 2021 р.	Продовження теми 2.4 Вивчення механізмів органічних реакцій в розчинах методами квантової хімії.
17	20 - 24 грудня 2021 р.	Тема 2.5 : Інтенсивність смуг поглинання в ІЧ-спектрах. Методи розрахунку будови молекул в електронно-збуджених станах.
18	27– 31 грудня 2021 р.	Продовження теми 2.5 Дослідження збуджених станів органічних сполук.

### Практичні заняття

Метою практикуму є закріплення теоретичних знань, отриманих на лекціях та в процесі самостійної роботи з літературними джерелами в ході вивчення навчальної дисципліни «Вступ до фаху». Матеріал практикуму спрямований на одержання досвіду розв'язання практичних задач щодо приготування розчинів, різних підходів до виразу концентрацій, ознайомлення з методиками зважування, фракційної перегонки, сублімації, випарювання та визначення фізичних констант речовин.

Тиждень	Тема	Опис запланованої роботи
1, 3	Знайомство з програмним пакетом ChemOffice. Хімічний редактор ChemDraw.	Опанування методики користування пакетом ChemOffice. Розбір можливостей програмного пакету. Знайомство з хімічним редактором ChemDraw. Відповідно до отриманого індивідуального завдання продемонструвати викладачу вміння записувати за допомогою програмних пакетів хімічні формули та реакції із зазначенням реакційних центрів.
5, 7	Програмний пакет HyperChem 8.0. Знайомство з інтерфейсом програми HyperChem. Основні можливості пакету. Створення та редагування простих молекулярних структур.	Опанування методики користування програмою HyperChem 8.0. Знайомство з інтерфейсом програми HyperChem 8.0. Відповідно до отриманого індивідуального завдання продемонструвати викладачу вміння створення та редагування простих молекулярних структур.
9, 11	Отримання оптимізованих структур компонентів біологічних молекул за допомогою методу молекулярної механіки.	Опанування методики проведення за допомогою програми HyperChem оптимізованих структур біологічних молекул за допомогою молекулярної механіки.

		<i>Відповідно до отриманого індивідуального завдання виконати оптимізацію .</i>
13, 15	<i>Проведення розрахунків енергетичних та структурних характеристик систем: біомолекули - молекули розчинника – іони за допомогою методів Монте Карло та молекулярної динаміки.</i>	<i>Опанування методики проведення на основі програми HyperChem розрахунків енергетичних параметрів молекул Відповідно до отриманого індивідуального завдання провести розрахунок енергетичних показників для запропонованої молекули.</i>
17	<i>Підсумкове заняття</i>	<i>До відома студентів доводиться кількість балів, яку вони набрали протягом семестру. Студенти, які були не допущеними до семестрової атестації з кредитного модуля, мають усунути причини, що призвели до цього.</i>

### **Лабораторні заняття**

*Лабораторні роботи з кредитного модуля «Комп'ютерна хімія» виконують з метою поглиблення знань предмету та набуття практичного досвіду застосування знань до вирішення прикладних задач з квантово-хімічних розрахунків. Виконання лабораторного практикуму надає змогу студентам одержати навички самостійного проведення розрахунків, аналізу результатів і складання обґрунтованих висновків. Для підготовки до лабораторних робіт) студенти використовують відповідну літературу.*

<b>Тиждень</b>	<b>Тема</b>	<b>Опис запланованої роботи</b>
2	<i>Робота в хімічному редакторі ChemDraw.</i>	<i>Знайомство з хімічним редактором ChemDraw. Побудова та створення невеликих молекул в 2D та 3D. ChemDraw. Запис схем реакцій із зазначенням реакційних центрів</i>
4	<i>Квантово-хімічні розрахунки в пакеті HyperChem 8.0.</i>	<i>За індивідуальним завданням викладача побудова та редагування молекул, побудова площинних (2D) та просторових (3D) молекулярних структури. Побудова просторових моделей біологічних макромолекул та їх компонентів. Розрахунок довжини зв'язків і кутів між ними в молекулярних моделях, дипольних моментів та потенціалу іонізації молекул</i>
6	<i>Формування поліпептида.</i>	<i>Створення та редагування поліпептидного ланцюга за індивідуальним завданням викладача</i>
8	<i>Оптимізація молекулярних структур компонентів біологічних молекул.</i>	<i>Оптимізація молекулярних структур компонентів біологічних молекул. за допомогою неемпіричних та напівемпіричних методів квантової хімії. Розрахунок молекулярних орбіталей. Розрахунок і візуалізація молекулярних орбіталей. Діаграма заселеності молекулярних орбіталей.</i>
10	<i>Розрахунки енергетичних параметрів систем.</i>	<i>Проведення розрахунків по мінімізації енергії системи, ентальпії, ентропії молекул. Оцінка</i>

		<i>енергії зв'язків в найпростіших молекулах, міжмолекулярні взаємодії, енергія сольватації</i>
12	<i>Моделювання динаміки та стану рівноваги.</i>	<i>Проведення в програмі HyperChem розрахунків по сольватуванню структури, оптимізація сольватованої молекули,</i>
14	<i>Вивчення методів розрахунку комплексоутворення</i>	<i>Отримання параметрів комплексоутворення молекул (біомолекул) з лігандами. Застосування різних моделей силових полів при дослідженні міжмолекулярних комплексів (розрахунки параметрів взаємодії) компонентів молекул.</i>
16	<i>Розрахунок моделі за умови нагріву</i>	<i>Проведення за допомогою програми HyperChem моделювання нагрівання системи</i>
18	<i>Підсумкове заняття</i>	<i>Захист лабораторних робіт</i>

### **Розрахунково графічна робота**

*Розрахунково-графічна робота виконується кожним студентом за індивідуальним завданням, виданим викладачем. Робота виконується з урахуванням теми магістерської дисертації. Робота включає виконання розрахунків енергетичних параметрів молекул речовин, що використовуються при проведенні власних експериментів. Завданням роботи є демонстрація біологічної та хімічної активності обраних хімічних речовин, що розглядаються в науковій роботі магістра.*

### **6. Самостійна робота магістра**

*Самостійна робота студента (СРС) протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, опанування методів квантово-хімічних розрахунків, що вивчалися на практичних заняттях, проведення розрахунків за первинними даними, отриманими на лабораторних заняттях, оформлення звітів з лабораторних робіт, підготовка до захисту лабораторних робіт, підготовку до модульної контрольної роботи, виконання домашньої контрольної роботи, підготовку до екзамену. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:*

<i>Вид СРС</i>	<i>Кількість годин на підготовку</i>
<i>Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу, оформлення звітів з лабораторних робіт, підготовка до розв'язку задач, повторення матеріалу практичних занять</i>	<i>5 годин на тиждень</i>
<i>Підготовка до захисту лабораторних робіт</i>	<i>3 години на тиждень</i>
<i>Підготовка до МКР (повторення матеріалу)</i>	<i>10 години</i>
<i>Виконання розрахунково графічної роботи</i>	<i>10 години</i>
<i>Підготовка до екзамену</i>	<i>30 годин</i>

## **Політика та контроль**

### **7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)**

*У звичайному режимі роботи університету лекції, лабораторні та практичні заняття проводяться в навчальних аудиторіях. У дистанційному режимі лекційні, практичні та*



лабораторні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський, Відвідування лекцій, практичних та лабораторних занять є обов'язковим.

На заняттях є необхідним відключення телефонів та недопустимим використання засобів зв'язку для пошуку інформації на гугл-диску викладача чи в інтернеті.

Враховуючи контингент студентів, на аудиторні заняття виносяться:

- 4 години лекційного матеріалу - лекційні заняття № 2 та №12 згідно плану лекційних занять.
- 2 години практичних занять - практичне заняття №4 - Проведення розрахунків енергетичних та структурних характеристик систем.
- 6 годин лабораторних занять – лабораторне заняття №4 Оптимізація молекулярних структур компонентів біологічних молекул та лабораторне заняття № 6 Моделювання динаміки та стану рівноваги -

Матеріал останніх занять опановується студентами самостійно. Для кращого засвоєння матеріалу навчальною програмою передбачено 78 год індивідуальних занять.

Правила захисту лабораторних робіт:

1. До захисту допускаються студенти, які правильно виконали розрахунки (при неправильно виконаних розрахунках їх слід усунути).
2. Захист відбувається на послідуєчому занятті шляхом опитування студента щодо теоретичних основ теми лабораторної роботи
3. Після перевірки знань викладачем за захист виставляється загальна оцінка і робота вважається захищеною.
4. Лабораторні роботи потрібно захищати на наступному лабораторному занятті у вільний час від проведення роботи. Несвоєчасні захист і виконання роботи без поважної причини штрафуються відповідно до правил призначення заохочувальних та штрафних балів.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:

1. Несвоєчасне виконання лабораторного практикуму без поважної причини штрафується 1 балом;
2. Несвоєчасний захист роботи без поважної причини штрафуються 1 балом;
3. За модернізацію лабораторних робіт нараховується від 1 до 6 заохочувальних балів;
5. За виконання завдань із удосконалення дидактичних матеріалів з дисципліни нараховується від 1 до 6 заохочувальних балів;
6. За активну роботу на практичному занятті нараховується до 0,5 заохочувальних балів (але не більше 6 балів за семестр).

Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського  
Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету.

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

Види контролю встановлюються відповідно до Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:

1. Поточний контроль: опитування за темою заняття на лабораторних роботах та практичних заняттях, МКР.
2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.

### 3. Семестровий контроль: письмовий екзамен.

#### **Рейтингова система оцінювання результатів навчання**

1. Рейтинг студента з кредитного модуля розраховується виходячи із 100-бальної шкали, з них 70 балів складає стартова шкала. Стартовий рейтинг (протягом семестру) складається з балів, що студент отримує за:

- роботу з лабораторного практикуму (8 тем занять);
- написання модульної контрольної роботи (МКР);
- написання та захист домашньої контрольної роботи (ДКР)

#### **2. Критерії нарахування балів з лабораторного практикуму:**

Оцінюється за якістю виконання та якістю захисту роботи.

##### **2.1. Робота з лабораторного практикуму**

- бездоганна робота – **10 балів**;
- є певні недоліки у підготовці та/або виконанні роботи – **6-9 бали**;
- є недоліки у підготовці та/або виконанні роботи – **3-5 бал**.

Робота не виконана або не захищена – **0 балів**.

##### **Виконання роботи:**

- робота виконана повністю і вірно протягом відведеного часу – **5 бали**;
- робота виконана майже повністю і вірно протягом відведеного часу або має неprincipові неточності – **4 балів**;
- робота виконана більше ніж наполовину протягом відведеного часу – **3 балів**;
- робота виконана протягом відведеного часу менше, ніж наполовину, результати роботи містять грубі помилки, відсутність виконання роботи – **0 балів**.

##### **Якість захисту роботи:**

- студент вірно і повністю виконав всі надані до захисту завдання (відповів на запитання) **5 бали**;
- студент вірно виконав всі надані для захисту завдання, але допустив несуттєві неточності – **4 бал**;
- студент при виконанні завдання (відповідях на запитання) допустив ряд суттєвих неточностей – **3 балів**;
- студент при виконанні завдання (відповідях на запитання) допустив суттєві неточності – **0 балів**.

#### **3 Критерії нарахування балів з модульного контролю.**

Модульний контроль включає написання контрольної роботи.

Ваговий бал контрольної роботи – **20 балів**.

Оцінювання роботи проводиться за наступною шкалою:

- повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – **10 балів**;
- достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації), або повна відповідь з незначними неточностями – **5-8 балів**;
- неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації) та незначні помилки – **4-6 балів**;
- незадовільна відповідь (не відповідає вимогам на «задовільно») – **0 балів**.

#### **4. Критерії нарахування балів за виконання домашньої контрольної роботи (ДКР)**

ДКР включає виконання завдання по визначенню властивостей біомолекул речовин, які вивчаються в магістерській науковій роботі магістранта. Робота передбачає проведення квантово-хімічних розрахунків за допомогою програми HyperChem та включає побудову молекул, її оптимізації в просторі, розрахунок її енергетичних параметрів,

індексів реакційної здатності, побудови сольватованої молекули та аналіз отриманих результатів.

Ваговий бал РГР складає - 20 балів

Відмінно – Бездоганно виконані та проаналізовані результати розрахунків, бездоганні відповіді на запитання викладача - 19-20 балів;

Добре – Розрахунки виконано з незначними помилками або недостатньо якісно проаналізовано результати, відповіді на запитання викладача мають неточності – 15-18 балів

Задовільно – Розрахунки виконано зі значними помилками не проаналізовано результати розрахунків, відповіді на запитання викладача мають значні недоліки – 10-14 балів.

5. Умовою отримання позитивної оцінки з календарного контролю є виконання всіх запланованих на цей час робіт (на час календарного контролю). На першому календарному контролі (8-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше  $0,5 \cdot 30 = 15$  балів. На другому календарному контролі (14-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше  $0,5 \cdot 70 = 35$  бал.

На екзамені студенти виконують екзаменаційну роботу, яка передбачає виконання комп'ютерного розрахунку. Кожний білет містить три завдання. Кожне завдання оцінюється за такими критеріями:

Система оцінювання кожного завдання передбачає:

- Вказана правильна відповідь- 9-10 балів
- Вказана неправильна відповідь, проте хід рішення задачі вірний -6-8 балів;
- Вказана неправильна відповідь – 0 балів

Максимальна сума балів, яку студент може набрати протягом семестру, складає 60 балів і включає бали за захист лабораторних робіт ( 2 робіт по 10 балів), написання МКР, написання та захист ДКР та додаткові заохочувальні бали за активну роботу на практичних заняттях:

$$RC = r_{лр} + r_{мкр} + r_{дкр} = 20+20+20= 60 \text{ балів}$$

Умовою допуску до екзамену є виконання та захист всіх лабораторних робіт, написання МКР, та кількість рейтингових балів не менше 40.

Екзаменаційна робота являє собою білет із 4 завданнями. Ваговий бал кожного завдання 10 балів.

Оцінювання кожного завдання:

Відмінно – Бездоганно виконано завдання та проаналізовані результати розрахунків, бездоганні відповіді на запитання викладача - 9-10 балів;

Добре – Розрахунки виконано з незначними помилками або недостатньо якісно проаналізовано результати, відповіді на запитання викладача мають неточності –6-8 балів

Задовільно – Розрахунки виконано зі значними помилками не проаналізовано результати розрахунків, відповіді на запитання викладача мають значні недоліки – 4-5 балів.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

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

- *перелік запитань до МКР та екзамену наведені у Moodle «Комп'ютерна хімія» (платформа Sikorsky-distance).*

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

**Складено** завідувачем кафедри, д.т.н., проф Чигиринець О.Е.

**Погоджено** Методичною комісією факультету<sup>1</sup> (протокол № 10 від 23.06.2021 р.)

**Ухвалено** кафедрою фізичної хімії (протокол № 13 від 30.06.2021 )

---