

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДВНЗ «ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА»

Фізико-технічний факультет

Кафедра фізики і хімії твердого тіла

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Квантово-хімічне моделювання

Освітня програма «Комп'ютерна фізика»

Спеціальність 104 Фізика та астрономія

Спеціалізація Фізика та астрономія

Галузь знань 10 Природничі науки

Затверджено на засіданні кафедри
Протокол № __ від “_” ____ 2021 р.

м. Івано-Франківськ - 2021

ЗМІСТ

1. Загальна інформація
2. Анотація до курсу
3. Мета та цілі курсу
4. Компетентності
5. Результати навчання
6. Організація навчання курсу
7. Система оцінювання курсу
8. Політика курсу
9. Рекомендована література

1. Загальна інформація	
Назва дисципліни	Квантово-хімічне моделювання
Рівень вищої освіти	бакалавр
Викладач (-і)	Никируй Любомир Іванович
Контактний телефон викладача	+380956991785
Е-mail викладача	lyubomyr.nykyruy@pnu.edu.ua
Формат дисципліни	Очний
Обсяг дисципліни	3 кредити ECTS
Посилання на сайт дистанційного навчання	http://www.d-learn.pu.if.ua
Консультації	
2. Анотація до курсу	
<p>Зміст та матеріал навчальної дисципліни стосується аналізу сучасних проблем у розрахункових методах фізики щодо можливостей моделювання структури та створення матеріалів із наперед заданими властивостями для вирішення задач фізики та астрономії. На даному навчальному курсі студенти отримують теоретичні основи та необхідні практичні навички застосування методів квантової хімії для розрахунків електронної структури і комплексу фізичних властивостей матеріалів, засвоюють основи роботи у прикладних програмних пакетах GAMESS US, Wien 2k, Burai, ADF та програмах обробки / аналізу розрахованих значень (Avogadro, Chemcraft, GaussSum, Molden, Xcrysden, тощо).</p>	
3. Мета та цілі курсу	
<p>Мета курсу: опанувати теоретичні основи та виробити практичні навички щодо виконання комп'ютерних розрахунків електронної структури твердих тіл. Практичне застосування методів в рамках функціоналу густини дозволить моделювати електронні процеси на одно- та багатопроцесорних комп'ютерах, візуалізувати та інтерпретувати отримані результати для наступного використання у сучасній фізиці.</p> <p>Завдання курсу:</p> <ul style="list-style-type: none"> – застосування чисельних методів для розв'язання задач науково-дослідницького та технологічного спрямування; – розвивати вміння застосовувати знання та набуті навички для розв'язання якісних та кількісних задач; – набуття обчислювальних навичок; – розвиток навичок графічного оформлення результатів досліджень у командному режимі та з використанням діалогового редактору графіки; – застосування спеціалізованих програмних засобів для інженерії матеріалів із наперед заданими властивостями; – застосування прикладних програмних пакетів для розв'язання задач квантової хімії; – аргументоване обґрунтування методу розв'язання поставленої задачі, наведення власних прикладів, формулювання висновків; – здатність оцінювати точність і достовірність отриманих результатів та інтерпретувати результати комп'ютерного аналізу; – самостійно проводити комп'ютеризовані дослідження та застосовувати дослідницькі навички для аналізу фізичних процесів в прикладних системах та матеріалах. 	
4. Компетентності	

Соціально-особистісні компетентності: наполегливість у досягненні мети; турбота про якість виконуваної роботи; креативність, здатність до системного мислення; відповідальність за якість виконуваних завдань.

Інструментальні компетентності: здатність до розв'язання складних спеціалізованих задач та практичних проблем у галузі прикладної фізики і наноматеріалів, що передбачає застосування теорій та методів фізики, математики та інженерії, алгоритмів, інформаційних технологій та спеціалізованого програмного забезпечення.

Професійні компетентності: розуміння призначення та ролі комп'ютерного програмного забезпечення для фізичних досліджень; уміння виконувати числові розрахунки, аналітичні перетворення, розв'язування фізичних задач у системі комп'ютерної математики Maple, MathCAD, побудова графіків; розуміння основних команд, типів даних та структури виразів у середовищі Maple, MathCAD.

Інтегральна компетентність: здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики та/або астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та/або астрономії і характеризується комплексністю та невизначеністю умов.

Загальні компетентності: здатність працювати в групах, здатність застосовувати практично набуті знання, здатність опрацьовувати первинну інформацію.

5. Результати навчання

ПРН 2. Знати і розуміти фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, приладів і наукоємних технологій, та методи дослідження властивостей речовин і матеріалів.

ПРН 3. Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій.

ПРН 5. Знати основні актуальні проблеми сучасної фізики та астрономії.

ПРН 6. Оцінювати вплив новітніх відкриттів на розвиток сучасної фізики та астрономії.

ПРН 9. Мати базові навички проведення теоретичних та / або експериментальних наукових досліджень з окремих спеціальних розділів фізики або астрономії, що виконуються індивідуально (автономно) та / або у складі наукової групи.

ПРН 11. Вміти упорядковувати, тлумачити та узагальнювати одержані наукові та практичні результати, робити висновки.

ПРН 16. Маги навички роботи із сучасною обчислювальною технікою, вміти використовувати стандартні пакети прикладних програм і програмувати на рівні, достатньому для реалізації чисельних методів розв'язування фізичних задач, комп'ютерного моделювання фізичних та астрономічних явищ і процесів, виконання обчислювальних експериментів.

ПРН 29. Використовувати навички організаційних емпіричних, статистичних та інтерпретаційних досліджень, аналізу, оцінки та синтезу нових ідей.

6. Організація навчання курсу

Обсяг навчальної дисципліни 90 год.

Вид заняття	Загальна кількість годин
лекції	16 год
семінарські заняття / практичні / лабораторні	14 год
самостійна робота	60 год

Ознаки курсу

Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний / вибірковий

II	104 Фізика та астрономія	1	вибірковий		
Тематика курсу					
Тема, план	Форма заняття	Література	Завдання, год	Вага оцінки	Термін виконання
Тема 1. Ознайомлення із базовими принципами квантової механіки та квантової хімії.	Лекція, Практичне заняття	[1-2, 4]	Опрацювати лекційний матеріал	5	До наступного заняття за розкладом
Тема 2. Теорема Блоха. k -вектори та обернений простір. Зонні структури: 1D, 2D та 3D	Лекція, Практичне заняття	[1, 2, 4]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися та виконати практичну роботу	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 3. Базисні набори векторів	Лекція, Практичне заняття		Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися та виконати практичну роботу	5	До наступного заняття за розкладом
Тема 4. Обмін та кореляція. Лінеаризовані методи. Псевдопотенціал. Молекулярна динаміка	Лекція, Практичне заняття		Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися та виконати практичну роботу	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 5. Густина станів. Візуальні індикатори зв'язків	Лекція, Практичне заняття		Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися та виконати практичну роботу	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 6. Розрахункові програмні пакети. Огляд програмних пакетів для розрахунків DFT та методів молекулярної динаміки.	Лекція, Практичне заняття	[1, 2, 4]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися та виконати практичну роботу	20	До наступного заняття за розкладом
Тема 7. Розрахункові програмні пакети: Avogadro, ChemCraft. Оптимізація структури.	Лекція, Практичне заняття		Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися та виконати практичну роботу	20	До наступного заняття за розкладом
Тема 8. Прикладні програми для моделювання фізичних процесів. Розрахунки з перших принципів у середовищах GAMESS US,	Лекція, лабораторна робота	[3, 4, 5, 7-9]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися та виконати	20	До наступного заняття за розкладом

Wien 2k, Burai, Quantum Espresso			практичну роботу		
7. Система оцінювання курсу					
Загальна система оцінювання курсу	<p>100 балів 70 протягом семестру 30 на залік: 70 балів підсумовуються за виконані завдання лабораторних робіт: На 30 балів – оцінюється виконання тестів у системі дистанційного навчання.</p> <p>Зараховано-“відмінно” – студент демонструє повні і глибокі знання навчального матеріалу, достовірний рівень розвитку умінь та навичок, правильне й обґрунтоване формулювання практичних висновків, наводить повний обґрунтований розв’язок прикладів та задач, аналізує причинно-наслідкові зв’язки; вільно володіє науковими термінами;</p> <p>Зараховано-“добре” – студент демонструє повні знання навчального матеріалу, але допускає незначні пропуски фактичного матеріалу, вміє застосувати його до розв’язання конкретних прикладів та задач, у деяких випадках нечітко формулює загалом правильні відповіді, допускає окремі несуттєві помилки та неточності розв’язках;</p> <p>Зараховано-“задовільно” – студент володіє більшою частиною фактичного матеріалу, але викладає його не досить послідовно і логічно, допускає істотні пропуски у відповіді, не завжди вміє правильно застосувати набуті знання до розв’язання конкретних прикладів та задач, нечітко, а інколи й невірно формулює основні твердження та причинно-наслідкові зв’язки;</p> <p>Незараховано – студент не володіє достатнім рівнем необхідних знань, умінь, навичок, науковими термінами</p>				
Вимоги до письмової роботи	Виконання завдань лабораторних робіт покликані встановити зв’язок між теоретичними знаннями, засвоєними на лекційних заняттях та практичними навиками для виконання прикладних завдань прикладної фізики.				
Лабораторні заняття	Лабораторне заняття проводиться з метою формування у студентів умінь і навичок з предмету, вирішення сформульованих завдань, їх перевірка та оцінювання. За метою і структурою лабораторні заняття є ланцюжком, який пов’язує теоретичне навчання і навчальну практику з дисципліни, а також передбачає попередній контроль знань студентів. Оцінка за лабораторне заняття враховується при виставленні підсумкової оцінки з дисципліни				
Умови допуску до підсумкового контролю	Студент повинен виконати завдання всіх лабораторних робіт та допускається до складання тестового контролю знань тільки після виконання та захисту всіх лабораторних робіт.				
8. Політика курсу					
<ul style="list-style-type: none"> - самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання (для осіб з особливими освітніми потребами ця вимога застосовується з урахуванням їхніх індивідуальних потреб і можливостей); - посилання на джерела інформації у разі використання ідей, розробок, тверджень, відомостей; - надання достовірної інформації про результати власної навчальної (наукової, творчої) діяльності, використані методики досліджень і джерела інформації. <p>Засвоєння пропущеної теми лекції з поважної причини перевіряється під час складання підсумкового контролю. Пропуск лекції з неповажної причини відпрацьовується студентом відповідно вимог кафедри, що встановлені на засіданні кафедри (співбесіда, реферат тощо). Пропущені практичні, семінарські та лабораторні заняття, незалежно від причини пропуску, студент відпрацьовує згідно з графіком консультацій Поточні „2”, отримані студентом під час засвоєння відповідної теми на практичному, семінарському та лабораторному занятті перескладаються викладачеві, який веде заняття до складання підсумкового контролю з обов’язковою відміткою у журналі обліку роботи академічних груп.</p>					
9. Рекомендована література					

1. А.П.Шпак, Ю.А.Куницький, О.О.Коротченко, С.Ю.Смик. Квантові низькорозмірні системи. К.: Академперіодика, 2003.- 310 с.
2. Д.М.Заячук. Низькорозмірні структури і надгратки. НУ „Львівська політехніка”, 2006. – 220 с.
3. Т.Є. Крохмільський. Вступ до квантових обчислень. Навчальний посібник. Львів: ЛНУ ім. Івана Франка, 2018, 204 с.
4. Юхновський, І. Р. (2002). Основи квантової механіки: Навч. пос. для студ. фізичн. спец. вищ. навч. закл. К.: Либідь, 390.
5. Гельман, Г. Г. (2011). Квантовая химия. Бином. Лаб. знаний.
6. Дмитриев, И. С. (1983). Электрон глазами химика:(Очерки о современной квантовой химии). Химия. Ленингр. отд-ние.
7. R.Martin Electronic Structure. Basic theory and practical methods. – Cambridge – 2004. – 642 p.
8. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон. — 3-е изд., испр. (эл.). — Электрон. Текстовые дан. (1 файл pdf : 522 с.). — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014.
9. Computational materials science: an introduction / June Gunn Lee // Second edition. | Boca Raton : CRC Press, Taylor & Francis, 2017. – 351 p.
10. Н.Ф.Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. М., Мир, Изд-во Моск. ун-та, 2001.
11. Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. - М.: Наука, 1995.-144 с.
12. Стрижак П.Є. Квантова хімія : Підруч. для студ. ВНЗ. – К. : Вид. дім "Києво-Могилянська академія", 2009. – 458 с.
13. Слета Л. О., Иванов В. В. Квантова хімія / Худож.-оформлювач Л.Д. Киркач-Осіпова. — Харків: Гімназія, 2008. — 443 с.
14. Deringer, V. L., & Dronskowski, R. (2013). Computational methods for Solids. Comprehensive Inorganic Chemistry II (Second Edition), Volume 9, 2013, Pages 59-87.
15. General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS) - User Guide.
16. Wien 2k – User Guide.
17. Xcrysden – User Guide.
18. Quantum Espresso – User Guide.
19. Веб ресурс: <https://avogadro.cc/docs/tools/bond-centric-manipulate-tool/>

Викладач _____ Никируй Л.І.