

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА**



**Факультет/інститут фізико-технічний**

**Кафедра фізики і хімії твердого тіла**

**СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**Основи комп'ютерного моделювання з перших принципів**

**Рівень вищої освіти: другий (магістерський)**

**Освітня програма: Прикладна фізика та наноматеріали**

**Предметна спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали**

**Спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали**

**Галузь знань: 10 Природничі науки**

**Затверджено на засіданні кафедри  
Протокол № 1 від “29” серпня 2023 р.**

**м. Івано-Франківськ – 2023 р.**

| <b>1. Загальна інформація</b>  |  |
|--|--|
| <b>Назва дисципліни</b>  | Основи комп'ютерного моделювання з перших принципів                          |
| <b>Викладач (-і)</b>   | Никируй Любомир Іванович   |
| <b>Контактний телефон викладача</b>  | 59-60-82   |
| <b>Е-mail викладача</b>  | <a href="mailto:lyubomyr.nykyruy@pnu.edu.ua">lyubomyr.nykyruy@pnu.edu.ua</a> |
| <b>Формат дисципліни</b>   | Очний  |
| <b>Обсяг дисципліни</b>  | 3 кредити ЄКТС, 90 год.  |
| <b>Посилання на сайт дистанційного навчання</b>  | <a href="https://d-learn.pnu.edu.ua/">https://d-learn.pnu.edu.ua/</a>        |
| <b>Консультації</b>  | Згідно з графіком консультацій   |
| <b>2. Анотація до навчальної дисципліни</b>  |  |
| <p>Дисципліна «Основи комп'ютерного моделювання з перших принципів» - вибіркова дисципліна, яка спрямована на ознайомлення студентів із моделюванням структури методами ab initio розрахунків (розрахунків із перших принципів) задля ефективного моделювання характеристик матеріалів із наперед заданими властивостями для вирішення задач сучасної фізики та астрономії.</p>  |  |
| <b>3. Мета та цілі навчальної дисципліни</b>   |  |
| <p>Мета курсу: використовуючи базові квантово-механічні знання, виробити навички щодо виконання комп'ютерних розрахунків електронної структури твердих тіл. Практичне застосування методів в рамках функціоналу густини дозволить моделювати електронні процеси на одно- та багатопроекторних комп'ютерах, візуалізувати та інтерпретувати отримані результати для наступного використання у сучасній фізиці.</p> <p>Завдання курсу:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– застосування чисельних методів для розв'язання задач науково-дослідницького та технологічного спрямування;</li> <li>– розвивати вміння застосовувати знання та набуті навички для розв'язання якісних та кількісних задач;</li> <li>– набуття обчислювальних навичок;</li> </ul> |  |

- 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. Організація навчання

##### Обсяг навчальної дисципліни

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

##### Ознаки навчальної дисципліни

| Семестр | Спеціальність                         | Курс (рік навчання) | Нормативний /вибірковий |
|---------|---------------------------------------|---------------------|-------------------------|
| 1       | 105 Прикладна фізика та наноматеріали | 1                   | вибірковий              |

##### Тематика навчальної дисципліни

| Тема  | кількість год. |        |           |
|---|----------------|--------|-----------|
|   | лекції         | практ. | сам. роб. |
| Тема 1. Основні положення квантової хімії та молекулярної механіки.                           | 1              |        | 10        |
| Тема 2. Молекулярна динаміка.   | 2              | 2      | 5         |
| Тема 3. Теорія молекулярних орбіталей Хартрі-Фока: детермінант Слетера, рівняння Хартрі-Фока, | 4              | 2      | 10        |

|   |    |    |    |
|---|----|----|----|
| спін, процедура самоузгодженого поля  |    |    |    |
| Тема 4. Базисні набори векторів.  | 1  | 1  | 5  |
| Тема 5. Обмін та кореляція. Напівемпіричні методи   | 2  | 3  | 10 |
| Тема 6. Теорія функціоналу густини  | 2  | 2  | 10 |
| Тема 7. Розрахункові програмні пакети. Огляд програмних пакетів для розрахунків DFT та методів молекулярної динаміки. | 4  | 4  | 10 |
| ЗАГ.:   | 16 | 14 | 60 |

### 5. Система оцінювання навчальної дисципліни

|   |  |
|---|--|
| Загальна система оцінювання навчальної дисципліни | <p>Усне опитування, тести, реферат, доповіді, презентації конспект, залік. Участь у роботі впродовж семестру/залік - 50/50. Результати складання семестрового контролю у вигляді заліків за 100-бальною шкалою Університету і переводяться у національну 2-бальну систему оцінювання («зараховано» чи «не зараховано») та відповідні оцінки ЄКТС. З дисциплін, що завершуються заліком, поточна успішність становить 100 балів.</p> <p>Оцінка «зараховано» відповідає 50-100 балів; оцінка « не зараховано» відповідає 1-49 балам.</p> <p><b>Зараховано-“відмінно”</b> – 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><b>Зараховано-“добре”</b> – 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><b>Зараховано-“задовільно”</b> – 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><b>Незараховано</b> – студент не володіє достатнім рівнем необхідних знань, умінь, навичок, науковими термінами</p> |
|---|--|

|  |  |
|--|--|
| Вимоги до письмових робіт              | Практичне заняття проводиться з метою формування у студентів умінь і навичок з предмету, вирішення сформульованих завдань, їх перевірка та оцінювання.. За метою і структурою практичні заняття є ланцюжком, який пов'язує теоретичне навчання і навчальну практику з дисципліни, а також передбачає попередній контроль знань студентів. Оцінка за практичне заняття враховується при виставленні підсумкової оцінки з дисципліни |
| Семінарські заняття                    | –  |
| Умови допуску до підсумкового контролю | Студент допускається до підсумкового контролю за наявності результатів тестування по тематиці практичних занять, оцінювання роботи студента під час практичних занять, доповідь, реферат.  |
| Підсумковий контроль                   | Форма контролю: залік<br>Форма здачі: комбінована  |

#### **6. Політика навчальної дисципліни**

|                          |  |
|--------------------------|--|
| Академічна доброчесність | <p>Дотримання академічної доброчесності засновується на ряді положень та принципів академічної доброчесності, що регламентують діяльність здобувачів вищої освіти та викладачів університету:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Кодекс честі Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.</li> <li>• Положення про Комісію з питань етики та академічної доброчесності Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.</li> <li>• Положення про запобігання академічному плагіату та інших видів академічної нечесності у навчальній та науково-дослідній роботі здобувачів освіти Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника .</li> <li>• Положення про запобігання академічному плагіату у Прикарпатському національному університеті імені Василя Стефаника.</li> <li>• Склад комісії з питань етики та академічної доброчесності у Прикарпатському національному університеті імені Василя Стефаника.</li> <li>• Лист МОН України «До питання уникнення проблем і помилок у практиках забезпечення</li> </ul> |
|--------------------------|--|

|  |  |
|--|--|
|  | <p>академічної доброчесності».</p> <p>Ознайомитися з даними положеннями та документами можна за посиланням: <a href="https://pnu.edu.ua/положення-про-запобігання-плагіату/">https://pnu.edu.ua/положення-про-запобігання-плагіату/</a></p>  |
| Пропуски занять (відпрацювання)                  | <p>Можливість і порядок відпрацювання пропущених здобувачем освіти занять регламентується «<a href="#">Положення про порядок організації та проведення оцінювання успішності здобувачів освіти ДВНЗ «Прикарпатського національного університету ім. Василя Стефаника» (введено в дію наказом ректора №799 від 26.11.2019)</a>» (див. ст. 4).</p> <p>Ознайомитися з положенням можна за посиланням: <a href="https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/">https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</a></p>   |
| Виконання завдання пізніше встановленого терміну | <p>У разі виконання завдання здобувачем освіти пізніше встановленого терміну, без попереднього узгодження ситуації з викладачем, оцінка за завдання – «незадовільно», відповідно до «<a href="#">Положення про порядок організації та проведення оцінювання успішності студентів ДВНЗ «Прикарпатського національного університету ім. Василя Стефаника» (введено в дію наказом ректора №799 від 26.11.2019)</a>» (див. ст. 4-5).</p> <p>Ознайомитися із положенням можна за посиланням: <a href="https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/">https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</a></p>                |
| Невідповідна поведінка під час заняття           | <p>Невідповідна поведінка під час заняття регламентується рядом положень про академічну доброчесність (див. вище) та може призвести до відрахування здобувача вищої освіти (студента) «за порушення навчальної дисципліни і правил внутрішнього розпорядку вищого закладу освіти», відповідно до п.14 «Відрахування студентів» «<a href="#">Положення про порядок переведення, відрахування та поновлення студентів вищих закладів освіти</a>».</p> <p>Ознайомитися із положенням можна за посиланням: <a href="https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/">https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</a></p> |
| Додаткові бали                                   | <p><b>Додаткові бали до поточного контролю</b> здобувач освіти може отримати, пройшовши навчальний курс у вигляді неформальної освіти з отриманням сертифікату в межах предмету вивчення дисципліни протягом</p>   |

|  |   |
|--|---|
|  | <p>навчального семестру, взявши участь у науковому, освітньому чи прикладному проєкті, який відповідає предмету дисципліни:</p> <p><i>2 бали</i> – нараховується здобувачам освіти, які пройшли навчальний курс у вигляді неформальної освіти з отриманням сертифікату в межах предмету вивчення дисципліни протягом навчального семестру.</p> <p><i>2 бали</i> – нараховується здобувачам освіти, які взяли участь у науковому, освітньому чи прикладному проєкті, який відповідає предмету дисципліни.</p> <p><i>1 бал</i> – нараховується здобувачам освіти, які підготували дайджест на певну тематику в межах вивчення дисципліни.</p> <p>Додаткові бали присуджуються у рамках «Положення про порядок організації та проведення оцінювання успішності студентів ДВНЗ «Прикарпатського національного університету ім. Василя Стефаника» (введено в дію наказом ректора №799 від 26.11.2019) (див. ст. 4).</p> <p>Ознайомитися із положенням можна за посиланням: <a href="https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/">https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</a></p> |
| Неформальна освіта   | <p>Можливість зарахування результатів неформальної освіти регламентується <a href="#">«Положенням про порядок зарахування результатів неформальної освіти у ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника» (введено в дію наказом ректора №819 від 29.11.2019)</a> Ознайомитися із положенням можна за посиланням: <a href="https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/">https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</a></p>   |
| <b>7. Рекомендована література</b>   |   |
| <ol style="list-style-type: none"> <li>1. А.П.Шпак, Ю.А.Куницький, О.О.Коротченко, С.Ю.Смик. Квантові низькорозмірні системи. К.: Академперіодика, 2003.- 310 с.</li> <li>2. Д.М.Заячук. Низькорозмірні структури і надгратки. НУ „Львівська політехніка”, 2006. – 220 с.</li> <li>3. Т.Є. Крохмільський. Вступ до квантових обчислень. Навчальний посібник. Львів: ЛНУ ім. Івана Франка, 2018, 204 с.</li> <li>4. Юхновський, І. Р. (2002). Основи квантової механіки: Навч. пос. для студ. фізичн. спец. вищ. навч. закл. К.: Либідь, 390.</li> <li>5. R.Martin. Electronic Structure. Basic theory and practical methods. – Cambrige – 2004. – 642 р.</li> <li>6. Computational materials science: an introduction / June Gunn Lee // Second edition.   Boca Raton : CRC Press, Taylor &amp; Francis, 2017. – 351 p.</li> </ol> |   |

7. Стрижак П.Є. Квантова хімія : Підруч. для студ. ВНЗ. – К. : Вид. дім "Києво-Могилянська академія", 2009. – 458 с.
8. Слета Л. О., Іванов В. В. Квантова хімія / Худож.-оформлювач Л.Д. Киркач-Осіпова. — Харків: Гімназія, 2008. — 443 с.
9. Deringer, V. L., & Dronskowski, R. (2013). Computational methods for Solids. Comprehensive Inorganic Chemistry II (Second Edition), Volume 9, 2013, Pages 59-87.
10. Веб-ресурс: Amsterdam Modeling Suite teaching materials: <https://www.scm.com/support/background/amsterdam-modeling-suite-teaching-materials/>
11. General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS) - User Guide.
12. Wien 2k – User Guide.
13. Xcrysden – User Guide.
14. Quantum Espresso – User Guide.
15. Веб ресурс: <https://avogadro.cc/docs/tools/bond-centric-manipulate-tool/>

Викладач \_\_\_\_\_ Никируй Л.І.