

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет

Кафедра молекулярної фізики



Заступник декана
з навчальних робіт
Оксана МОМОТ
2021 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Квантово-механічні методи досліджень фізичних властивостей молекул
для студентів

галузь знань	<u>10: Природничі науки</u>
спеціальність	<u>104: Фізика та астрономія</u>
освітній рівень	<u>бакалавр</u>
освітня програма	<u>Фізика</u>
Спеціалізований вибірковий блок	<u>Молекулярна фізика</u>
вид дисципліни	<u>вибіркова</u>

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2021/2022</u>
Семестр	<u>7</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>4</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>залік</u>

Викладачі: Ніколаєнко Т.Ю., асистент кафедри молекулярної фізики, д. ф.-м. н.

Пролонговано: на 2022/2023 н.р. [Signature] «30» 08 2022 р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)
(підпис, ПІБ, дата)

Розробники: **Ніколаєнко Т.Ю.** доктор фіз.-мат. наук,
асистент кафедри кафедри молекулярної фізики

ЗАТВЕРДЖЕНО
Зав. кафедри молекулярної фізики


_____ (Булавін Л.А.)
(підпис)

Протокол № 16 від «10» червня 2021 р.

Схвалено науково - методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 4 від «22» червня 2021 року

Голова науково-методичної комісії _____ (Олег ОЛІХ)
(підпис)

«_____» _____ 20__ року

Розробники: **Ніколаєнко Т.Ю.** доктор фіз.-мат. наук,
асистент кафедри кафедри молекулярної фізики

ЗАТВЕРДЖЕНО
Зав. кафедри молекулярної фізики

_____ (Булавін Л.А.)
(підпис)

Протокол № 16 від «10» червня 2021 р.

Схвалено науково - методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 4 від «22» червня 2021 року

Голова науково-методичної комісії _____ (Олег ОЛІХ)
(підпис)

« _____ » _____ 20__ року

ВСТУП

1. Мета дисципліни – отримання студентами теоретичних основ сучасних методів розрахунку геометрії, енергії, електронних та коливних властивостей молекул та ознайомлення студентів з відповідними сучасними програмними пакетами; вивчення залежностей оптичних спектральних властивостей молекул в залежності від їх будови для їх застосувань у наукових розробках та прикладних галузях.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основи математичного аналізу, математичного моделювання, механіки, електрики та магнетизму, оптики, молекулярної фізики, термодинаміки, квантової механіки.
2. Вміти застосовувати попередні знання з курсів математичного аналізу, диференціальних рівнянь, математичного моделювання, квантової механіки.
3. Володіти елементарними навичками математичних перетворень, побудови алгоритмів, опису квантових систем.

3. Анотація навчальної дисципліни / референс:

В рамках курсу «Квантово-механічні методи досліджень фізичних властивостей молекул» вивчаються: квантово-механічні методи розрахунку геометрії, енергії, електронних та коливних властивостей молекул та ознайомлення студентів з відповідними сучасними програмними пакетами; вивчення залежностей оптичних спектральних властивостей молекул в залежності від їх будови для їх застосувань у наукових розробках та прикладних галузях.

4. Завдання (навчальні цілі) – оволодіння методами і принципами квантово-механічних методів розрахунків для досліджень фізичних властивостей молекул, порівняння отриманих результатів з експериментальними характеристиками, розуміння меж застосовності методів для різних типів молекул, використання методів для вільного ознайомлення з науковою літературою, використання сучасних програмних пакетів для розрахунку при виконанні відповідних кваліфікаційних робіт та подальшої самостійної наукової роботи.

Згідно вимог проекту Стандарту вищої освіти України (перший рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Фізика», спеціальність 104 «Фізика та астрономія», дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних компетентностей:

Інтегральних:

Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми у певній галузі професійної діяльності або у процесі навчання, що передбачає проведення досліджень та/або здійснення інновацій та характеризується невизначеністю умов і вимог.

Загальних:

- здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу;
- навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

Фахових:

- здатність використовувати на практиці базові знання з математики як математичного апарату фізики і астрономії при вивченні та дослідженні фізичних та астрономічних явищ і процесів;
- здатність виконувати обчислювальні експерименти, використовувати чисельні методи для розв'язування фізичних та астрономічних задач і моделювання фізичних систем;
- орієнтація на найвищі наукові стандарти – обізнаність щодо фундаментальних відкриттів та теорій, які суттєво вплинули на розвиток фізики, астрономії та інших природничих наук.
-

5. Результати навчання за дисципліною: (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

Код	Результат навчання	Методи викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
	Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)			

1.1	Знати основні методи; їх можливості та обмеження застосування; основні фізичні властивості молекул: електронна, коливна структура, енергія, заряди тощо; напівемпіричні та першопринципні методи розрахунку будови та оптичних властивостей молекул; знати сучасні програмні пакети GAUSSIAN, Avogadro, HyperChem та ін..	<i>Лекції Самостійна робота</i>	Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік	20
1.2	Знати основи методу функціоналу густини та особливості його застосування до задач досліджень фізичних властивостей молекул; перелік функціоналів, що використовуються при розрахунках та критерії їх вибору.	<i>Лекції Самостійна робота</i>	Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, іспит	20
2.1	Вміти: будувати молекули, здійснювати розрахунки їх геометричної оптимізації, електронних та коливних властивостей, енергетичних характеристик та порівнювати їх з відповідними експериментальними даними.	<i>Лекції Самостійна робота Практичні роботи</i>	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит	30
2.2	Вміти: визначати, який метод розрахунку можна застосувати до конкретної наукової проблеми. Знати, які відповідні програмні пакети, які існують для такого роду розрахунків.	<i>Лекції Самостійна робота Практичні роботи</i>	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит	10
2.3	Вміти: знаходити у довідниковій літературі відповідні параметри, що необхідні для проведення розрахунків властивостей молекул, наприклад: максимум спектру поглинання, величина енергетичної щільності тощо.	<i>Лекції Самостійна робота Практичні роботи</i>	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит	10
3.1.	<i>Демонструвати спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією, ведення професійної наукової дискусії</i>	<i>Лекції Самостійна робота Практичні роботи</i>	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, іспит	5
3.2.	<i>Письмово відображувати та презентувати результати своїх досліджень українською мовою</i>	<i>Лекції Самостійна робота Практичні роботи</i>	Модульна контрольна робота, Звіти про виконання	5

			практичних робіт, іспит	
--	--	--	----------------------------	--

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін)

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2
Програмні результати навчання							
ПРН1. Знати, розуміти та вміти застосовувати основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних 8 фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики та/або астрономії.	+	+					
ПРН4. Вміти застосовувати базові математичні знання, які використовуються у фізиці та астрономії: з аналітичної геометрії, лінійної алгебри, математичного аналізу, диференціальних та інтегральних рівнянь, теорії ймовірностей та математичної статистики, теорії груп, методів математичної фізики, теорії функцій комплексної змінної, математичного моделювання.		+	+	+			
ПРН13. Розуміти зв'язок фізики та/або астрономії з іншими природничими та інженерними науками, бути обізнаним з окремими (відповідно до спеціалізації) основними поняттями прикладної фізики, матеріалознавства, інженерії, хімії, біології тощо, а також з окремими об'єктами (технологічними процесами) та природними явищами, що є предметом дослідження інших наук і, водночас, можуть бути предметами фізичних або астрономічних досліджень.	+		+				
ПРН16. Мати 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 явищ і процесів, виконання обчислювальних експериментів.					+	+	+

. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. *Модульна контрольна робота 1: РН 1.1, 3.2*- 10 балів / 5 балів
2. *Захист виконаних індивідуальних завдань: РН 2.1-2.3, 3.2* - 10 балів / 5 балів
3. *Захист реферату 1: РН 1.1, 3.1* - 10 балів / 5 балів
4. *Модульна контрольна робота 2: РН 1.2, 3.2* - 10 балів / 5 балів
5. *Захист виконаних індивідуальних завдань 2: РН 2.1-2.3, 3.2* - 10 балів / 5 балів
6. *Захист реферату 2: РН 1.2, 3.1* - 10 балів / 5 балів

- підсумкове оцінювання: у формі заліку

Підсумкова оцінка з освітнього компонента в цілому, підсумковою формою контролю за яким встановлено залік, визначається як сума оцінок (балів) за всіма успішно оціненими результатами навчання під час семестру (оцінки нижче мінімального порогового рівня до підсумкової оцінки не додаються) та оцінки, отриманої під час заліку.

Формою проведення заліку є написання письмової роботи з подальшою усною співбесідою. Результатами навчання, які оцінюються на іспиті, є РН 1.1-3.2. Максимальна кількість балів, яка може бути отримати здобувачем освіти під час іспиту, становить 40 балів за 100 бальною шкалою.

Перескладання семестрового контролю з метою покращення позитивної оцінки не допускається.

- умови допуску до підсумкового заліку:

Обов'язковою умовою допуску до іспиту є виконання всіх індивідуальних завдань та написання модульних контрольних робіт. Здобувач освіти не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 20 балів.

7.2. Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи 1 - 2 проводяться по завершенні тематичних лекцій з Розділів 1-2 відповідно.

Захист звітів практичних робіт проводиться упродовж семестру.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	Практ.	Сам. робота
<i>Розділ 1. Неемпіричний підхід до опису електронної структури молекул</i>				
1	ТЕМА 1. ВСТУП. КВАНТОВО-МЕХАНІЧНИЙ ПІДХІД ДО ВИВЧЕННЯ ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОЛЕКУЛ ІЗ ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ. Молекула як сукупність ядер і електронів. Характерні розміри молекул, характерні масштаби їхніх фізичних параметрів. Область застосування стаціонарного рівняння Шредингера для опису структури молекули. Характерні величини похибок сучасних квантово-механічних методів дослідження фізичних властивостей молекул. Історичний огляд розвитку квантової хімії. Найбільш поширені квантово-механічні пакети та їх особливості. Основні режими роботи квантово-механічних пакетів: розрахунок енергії та оптимізація геометрії с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.	10	0	20
2	ТЕМА 2. МЕТОД ХАРТРІ-ФОКА ТА АСПЕКТИ ПРАКТИЧНОЇ РЕАЛІЗАЦІЇ КВАНТОВО-МЕХАНІЧНИХ РОЗРАХУНКІВ. Фізична модель середнього поля. Метод розмінностей і система атомних одиниць. Оператор Фока, схема Хартрі та рівняння Хартрі-Фока. Обмінна та кореляційна енергії. Молекулярні орбіталі та їх розклад по базисних функціях. Переваги використання Гауссових базисних функцій. Стандартні базисні набори. Методи обчислення одно- та двоелектронних кулонівських інтегралів. Загальний алгоритм роботи квантово-механічного програмного пакету у режимах розрахунку енергії, оптимізації геометрії та сканування гіперповерхні потенціальної енергії. Синтаксис пакетів NwChem та Gaussian с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.	12	0	10
<i>Підсумкова модульна контрольна робота 1</i>		2		
<i>Розділ 2. Сучасні методи розрахунку фізичних властивостей молекул</i>				
3	ТЕМА 3. ФІЗИЧНІ ОБМЕЖЕННЯ МОДЕЛІ СЕРЕДЬОГО ПОЛЯ ТА МЕТОДУ ХАРТРІ-ФОКА. Багатодетермінантний розклад хвильової функції. Кореляція руху електронів. Огляд пост-Хартрі-Фоківських методів.	3	0	10
4	ТЕМА 4. ФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОЛЕКУЛ, ЯКІ МОЖНА ВИЗНАЧИТИ ЗА РЕЗУЛЬТАТАМИ КВАНТОВО-МЕХАНІЧНИХ РОЗРАХУНКІВ. Взаємозв'язок фізичних властивостей молекул із похідними енергії електронної підсистеми за різними параметрами. Сили Геллмана-Фейнмана. Особливості застосування теореми Геллмана-Фейнмана до наближених хвильових функцій. Метод функції Лагранжа для визначення фізичних властивостей молекул за хвильовими функціями, одержаними методами конфігураційної взаємодії та/або спарених кластерів. Поняття ефективних атомних зарядів та фізичні моделі їх визначення. Схеми Малікена, тензору атомної поляризованості та апроксимації електростатичного потенціалу.	3	0	5
5	ТЕМА 5. ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ МОЛЛЕРА-ПЛЕССЕТА. Стандартна квантово-механічна теорія збурень Релея-Шредингера. Оператор Фока та оператор Гамільтона. Врахування кореляції руху електронів за допомогою теорії збурень Меллера-Плессета.	3	0	5
6	ТЕМА 6. МЕТОД КОНФІГУРАЦІЙНОЇ ВЗАЄМОДІЇ. Фізичний зміст понять «заселені» та «незаселені» молекулярні орбіталі. Детермінанти Слетера як базис для розкладу багаточастинкової	3	0	5

	хвильової функції. Сутність методу конфігураційної взаємодії та загальний алгоритм визначення коефіцієнтів розкладу багаточастинкової хвильової функції за визначниками Слетера. Оператори народження і знищення. Операторне формулювання методу конфігураційної взаємодії. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції. Опрацювання наукових публікацій.			
7	ТЕМА 7. МЕТОД ЗЧЕПЛЕНИХ КЛАСТЕРІВ. Переваги та недоліки методу конфігураційної взаємодії. Поняття масштабною відповідності. Сутність методу спарених кластерів. Оператори n -кратних збуджень хвильової функції. Порівняння методів спарених кластерів та методу конфігураційної взаємодії. Розрахунок енергії молекули у наближеннях CCSD та CCSD(T). с.р.с. Вивчення матеріалу лекції. Опрацювання наукових публікацій.	4	0	10
8	ТЕМА 8. ТЕОРІЯ ФУНКЦІОНАЛУ ГУСТИНИ. Однорідний ідеальний газ електронів. Модель Томаса-Фермі та квантово-механічні поправки до неї. Фізичні основи теорії функціоналу густини. Теореми Хоенберга-Кона. Орбіталі Кона-Шема. Сучасні обмінно-кореляційні функціонали та їх класифікація. Гібридні обмінно-кореляційні функціонали. Фізичні обмеження відомих обмінно-кореляційних функціоналів та методи їх виправлення. Meta- та hyper-CGA функціонали. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції. Опрацювання наукових публікацій.	3	0	5
9	ТЕМА 9. ПРАКТИЧНІ АСПЕКТИ ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДІВ КВАНТОВОЇ ХІМІЇ. Порівняння методів врахування кореляції електронів. Обчислювальна складність розглянутих методів. Суміщення різних методів розрахунку. Енергія дисоціації молекули водню і внесок до неї від енергії руху ядер. Поправка на суперпозицію базисних наборів (BSSE). Модель континуального діелектричного оточення (PCM). с.р.с. Вивчення матеріалу лекції. Опрацювання наукових публікацій.	3	0	5
	Підсумкова модульна контрольна робота 2	2		
	ВСЬОГО	44	0	75

Примітка: слід зазначити теми, винесені на самостійне вивчення

Загальний обсяг 120 год., в тому числі:

Лекцій – 44 год.

Самостійна робота - 75 год.

9. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

Основна: (Базова)

1. Jensen F. Introduction to computational chemistry. – Wiley, 1999. – 222 p.
2. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. – Москва: Мир, 2001. – 518 с.
3. Helgaker T., Jorgensen P., Olsen J. Molecular electronic-structure theory. – Wiley, 2000. – 908 p.
4. Piela L.. Ideas of Quantum Chemistry. – Elsevier, 2007. – 1086 p.
5. Вакарчук І.О. Квантова механіка. – Львів: Львівський державний університет імені І. Франка, 1998. – 616 с.
6. Townsend J.S. Quantum Physics: A Fundamental Approach to Modern Physics. – University Science Books, 2010. – 411 p.

Додаткова:

1. Шпак А.П., Куницький Ю.А., Федоров В.С. Електронна структура та властивості твердих тіл. – Київ, 2004.
2. Погорелов В.С. Комбінаційне розсіяння світла, Київ, ВПЦ КНУ, 2004 р.

3. Gillespie R. J., Popelier P. L. A. Chemical Bonding and Molecular Geometry: From Lewis to Electron Densities // Oxford University Press, 2001 – 90 p.
4. Weinhold F. Valency and Bonding: A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective. Cambridge University Press, 2005. – 749 p.
5. http://www.ni.com/pdf/manuals/371780n_0114.pdf.
6. http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_chemistry_computer_programs
7. <https://www.abinit.org/>