

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



Факультет/інститут фізико-технічний

Кафедра фізики і хімії твердого тіла

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Квантові методи у прикладній фізиці

Освітня програма **Прикладна фізика та наноматеріали**

Спеціалізація **Фізика**

Спеціальність **105 Прикладна фізика та наноматеріали**

Галузь знань **10 Природничі науки**

Затверджено на засіданні кафедри
Протокол № 1 від “30” серпня 2022 р.

м. Івано-Франківськ – 2022

ЗМІСТ

1. Загальна інформація
2. Опис дисципліни
3. Структура курсу
4. Система оцінювання курсу
5. Оцінювання відповідно до графіку навчального процесу (зразок)
6. Ресурсне забезпечення
7. Контактна інформація
8. Політика навчальної дисципліни

1. Загальна інформація	
Назва дисципліни	Квантові методи у прикладній фізиці
Освітня програма	
Спеціалізація (за наявності)	
Спеціальність	
Галузь знань	
Освітній рівень	Другий рівень освіти
Статус дисципліни	Основна
Курс / семестр	1 / 1
Розподіл за видами занять та годинами навчання (якщо передбачені інші види, додати)	Лекції – 14 год. Практичні заняття – 16 год. Самостійна робота – 60 год.
Мова викладання	Українська
Посилання на сайт дистанційного навчання	https://test-d-learn.pnu.edu.ua/
2. Опис дисципліни	
<p>Дисципліна «Квантові методи у прикладній фізиці» є курсом за вибором, який пропонується студентам природничих спеціальностей професійної підготовки фахівців освітнього рівня «магістр». Курс передбачає одержання і застосування студентом знань основних принципів і законів квантової механіки. Курс служить основою вивчення багатьох інших розділів фізики.</p>	
Мета та цілі курсу	
<p>Мета: 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 однокі- та багатопроцесорних комп'ютерах, візуалізувати та інтерпретувати отримані результати для наступного використання у сучасній фізиці.</p> <ul style="list-style-type: none"> – Завдання: 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. 	

3. Структура курсу			
№	Тема	Результати навчання	Завдання
1	Тема 1. Ознайомлення із базовими принципами квантової механіки та квантової хімії.	Розуміти принципи квантової хімії та застосування отриманих навиків з квантової механіки для розрахунку фундаментальних властивостей матеріалів	Контрольні запитання, підготовка мультимедійної презентації, завдання для самостійної роботи
2	Тема 2. Молекулярна механіка та молекулярна динаміка.	Застосовувати базові принципи квантової механіки та квантової хімії, вміння порівняння популярних силових полів; розуміти продуктивність молекулярної механіки.	Контрольні запитання, підготовка мультимедійної презентації, завдання для самостійної роботи (тести).
3	Тема 3. Молекулярна орбітальна теорія Гартрі-Фока	Розуміти детермінанти Слейтера, принцип антисиметрії, виведення рівнянь Хартрі-Фока, енергетичні вирази Хартрі-Фока для довільних спін-орбітальних конфігурацій, спінову інтеграцію, обмежені та необмежені посилення, процедуру самоузгодженого поля (SCF)	Контрольні запитання, підготовка мультимедійної презентації, завдання для самостійної роботи.
4.	Тема 4. Базисні набори	Вміти записувати функції Слейтера та Гауса, набори розщепленої валентності, кореляційно-узгоджені набори, набори основної валентності, тощо. Обмін базовим набором EMSL	
5	Тема 5. Обмін та кореляція. Лінеаризовані методи. Псевдопотенціал.	Вміти користуватися сучасними методами врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної взаємодії.	Контрольні запитання, підготовка мультимедійної презентації, завдання для самостійної роботи.
6	Тема 6. Оптимізація геометрії. Вібраційний частотний аналіз	Вміти виконувати аналіз симетрії, визначати гармоніки основних частот, нульову вібраційну енергію (ZPVE), індекс Гессе, розрізняти мінімуми від перехідних станів	Контрольні запитання, підготовка мультимедійної презентації, завдання для самостійної роботи.

Критерії поточного оцінювання:

«90-100 балів» – здобувач вищої освіти в повному обсязі володіє навчальним матеріалом, вільно самостійно та аргументовано його викладає під час усних виступів та письмових відповідей (в т. ч. у вигляді мультимедійних презентацій), глибоко та всебічно розкриває зміст теоретичних питань та практичних завдань, використовуючи при цьому обов'язкову та додаткову літературу.

«70-89 балів» – здобувач вищої освіти достатньо повно володіє навчальним матеріалом, обґрунтовано його викладає під час усних виступів та письмових відповідей (в т. ч. у вигляді мультимедійних презентацій), в основному розкриває зміст теоретичних питань та практичних завдань, використовуючи при цьому обов'язкову літературу. Але при викладанні деяких питань не вистачає достатньої глибини та аргументації, допускаються при цьому окремі несуттєві неточності та незначні помилки.

«50-69 балів» – здобувач вищої освіти в цілому володіє навчальним матеріалом викладає його основний зміст під час усних виступів та письмових відповідей (в т. ч. у вигляді мультимедійних презентацій), але без глибокого всебічного аналізу, обґрунтування та аргументації, без використання необхідної літератури, допускаючи при цьому окремі суттєві неточності та помилки.

«Менше 50 балів» – здобувач вищої освіти не в повному обсязі володіє навчальним матеріалом. Фрагментарно, поверхово (без аргументації та обґрунтування) викладає його під час усних виступів та письмових відповідей, недостатньо розкриває зміст теоретичних питань та практичних завдань, допускаючи при цьому суттєві неточності.

Контроль за самостійну роботу.

Самостійна робота здобувачів освіти передбачає:

1. Опитування, тестування.
2. Підготовка завдання у рамках початкової теми із наступною доповіддю.

Тестовий контроль. Студент опрацьовує питання, що призначені для самостійного вивчення і для контролю проходить тестування в системі дистанційного навчання (d-learn.pnu.edu.ua) (дві спроби – кращий результат).

Оцінювання за кожен тестовий контроль здійснюється за 100 бальною шкалою. Вага оцінки за відповідну тему відображена у таблиці вище. Максимальна кількість балів, яку здобувач освіти може отримати за заняття складає 2 балів.

Підсумковий семестровий контроль являє собою підсумкове оцінювання результатів навчання здобувача вищої освіти за семестр, що з даної дисципліни здійснюється у формі екзамену. Підсумковий семестровий контроль оцінюється від 0 до 100 балів і переводиться у національну шкалу та шкалу ЄКТС.

Оцінювання за екзамен відбувається у 100-бальній шкалі, отримана оцінка сходиться на ваговий коефіцієнт 0,2. Оцінка за екзамен формується на основі підсумкового тестування.

Повторне складання екзаменів допускається не більше двох разів з кожної дисципліни: один раз викладачеві (талон №2) тестування в системі дистанційного навчання + усне опитування відповідно до програмових вимог, другий – комісії (талон №3) реалізується виключно у тестовій формі з використанням організаційно-технологічних процесів.

Якщо студент не склав навчальну дисципліну за талоном 3, дозволяється повторне вивчення навчальної дисципліни впродовж наступного семестру (планується за рахунок власного часу студента і не фінансується з бюджетних коштів).

Шкала оцінювання для екзамену

університетська	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90-100	A	відмінно
80-89	B	добре
70-79	C	
60-69	D	задовільно

50-59	E	
25-49	FX	незадовільно з можливістю повторного складання
0-24	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

6. Ресурсне забезпечення

Матеріально-технічне забезпечення

Мультимедіа, комп'ютери

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. R.Martin Electronic Structure. Basic theory and practical methods. – Cambridge – 2004. – 642 p.
6. Computational materials science: an introduction / June Gunn Lee // Second edition. | Boca Raton : CRC Press, Taylor & Francis, 2017. – 351 p.
7. Стрижак П.Є. Квантова хімія : Підруч. для студ. ВНЗ. – К. : Вид. дім "Кисво-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. General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS) - User Guide.
11. Wien 2k – User Guide.
12. Xcrysden – User Guide.
13. Quantum Espresso – User Guide.
14. Веб ресурс: <https://avogadro.cc/docs/tools/bond-centric-manipulate-tool/>

7. Контактна інформація

Кафедра	Кафедра фізики і хімії твердого тіла м. Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57, каб. 216а тел. +38 (0342) 59-60-82 https://kfhtt.pnu.edu.ua/ Сторінки в соцмережах: https://www.facebook.com/pcss.pnu
---------	--

Викладач	Никируй Любомир Іванович Кандидат фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри фізики і хімії твердого тіла.
Контактна інформація викладачів	+38 (095) 699 17 85 lyubomyr.nykyruy@pnu.edu.ua Робочі години: Пн-Пт – 8:30 – 17:00

8. 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"> • Кодекс честі Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника. • Положення про Комісію з питань етики та академічної доброчесності Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника. • Положення про запобігання академічному плагіату та інших видів академічної нечесності у навчальній та науково-дослідній роботі здобувачів освіти Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника . • Положення про запобігання академічному плагіату у Прикарпатському національному університеті імені Василя Стефаника. • Склад комісії з питань етики та академічної доброчесності у Прикарпатському національному університеті імені Василя Стефаника. • Лист МОН України «До питання уникнення проблем і помилок у практиках забезпечення академічної доброчесності». <p>Ознайомитися з даними положеннями та документами можна за посиланням: https://pnu.edu.ua/положення-про-запобігання-плагіату/</p>
Пропуски занять (відпрацювання)	<p>Можливість і порядок відпрацювання пропущених здобувачем освіти занять регламентується «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) (див. ст. 4).</p> <p>Ознайомитися з положенням можна за посиланням: https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</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 «Положення про порядок організації та проведення оцінювання успішності студентів ДВНЗ «Прикарпатського національного університету ім. Василя Стефаника» (введено в</p>

	<p>дію наказом ректора №799 від 26.11.2019) (див. ст. 4-5). Ознайомитися із положенням можна за посиланням: https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</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» «Положення про порядок переведення, відрахування та поновлення студентів вищих закладів освіти». Ознайомитися із положенням можна за посиланням: https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</p>
Додаткові бали	<p>Додаткові бали до поточного контролю здобувач освіти може отримати, пройшовши навчальний курс у вигляді неформальної освіти з отриманням сертифікату в межах предмету вивчення дисципліни протягом 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). Ознайомитися із положенням можна за посиланням: https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</p>
Неформальна освіта	<p>Можливість зарахування результатів неформальної освіти регламентується «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) Ознайомитися із положенням можна за посиланням: https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</p>

Викладач _____ Л.І. Никируй