



STUDIJŲ DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas	Kodas
Įvadas į kompiuterinę chemiją	

Dėstytojas / a (-ai)	Padalinys (-iai)
Koordinuojantis (-i): prof. Kęstutis Aidas Kitas / a (-i): doc. Mindaugas Mačernis, doc. Stepas Toliautas, dr. Laura Baliulytė	Fizikos fakultetas

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) tipas
Pirmoji pakopa	Pasirenkamasis

Igyvendinimo forma	Vykdymo laikotarpis	Vykdymo kalba (-os)
Auditorinis būdas	Rudens semestras	Lietuvių arba anglų

Reikalavimai studijuojančiajam	
Išankstiniai reikalavimai: kvantinė mechanika	Gretutiniai reikalavimai (jei yra):

Dalyko (modulio) apimtis kreditais	Visas studento darbo krūvis	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiško darbo valandos
5	140	64	76

Dalyko (modulio) tikslas		
<p>Dalyko tikslas dvejopas:</p> <ol style="list-style-type: none"> Supažindinti studentus su šiuolaikiniais molekulių modeliavimo metodais ir pagrindinėmis koncepcijomis, tokiais kaip <i>ab initio</i> Hartree-Fock modeliu bei koreliaciniais daugiakonfigūraciniu, susietųjų klasterių, Møller-Plesset modeliais, tankio funkcionalo teorijos bei molekulinės dinamikos simuliacijų pagrindais. Išugdyti studentų praktinius molekulių modeliavimo metodų taikymo gebėjimus, suteikiant molekulių struktūrinių, energetinių ir spektroskopinių savybių modeliavimo patirties. 		
Dalyko (modulio) studijų rezultatai	Studijų metodai	Vertinimo metodai
Supažindinti su šiuolaikiniais molekulių ir jų sistemų modeliavimo metodų teoriniais pagrindais	Paskaitos, savarankiškas literatūros studijavimas	Egzaminas raštu
Suteikti praktinės molekulių modeliavimo, taikant molekulių kvantinės mechanikos metodus, patirties	Seminarai, praktinis modeliavimo užduočių sprendimas	Individualaus projekto ataskaita ir jos pristatymas

Temos	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiškų studijų laikas ir užduotys
-------	----------------------------	---

	Paskaitos	Konsultacijos	Seminarai	Pratybos	Laboratoriniai darbai	Praktika	Visas kontaktinis darbas	Savarankiškas darbas	Savarankiškai atliekamos užduotys
1. Įvadas į molekulių stereochemiją ir struktūrą, chiraliskumas, organinių junginių klasifikacija	2		0				2	2	Literatūros skaitymas
2. Bra-ket formalizmo pagrindai, variacinis principas, tikrinių verčių lygties sprendimas matricos diagonalizavimo būdu	2		0				2	2	Literatūros skaitymas
3. Born'o-Oppenheimer'io artinys, potencinės energijos hiperpaviršius, Pauli antisimetrijos principas, Hartree'io sandauga, Slater'io determinantas, LCAO artinys, Hartree-Fock'o lygtys, Roothaan'o-Hall'o lygtys, suderintinio lauko procedūra	8		4				12	16	Literatūros skaitymas, praktinių modeliavimo užduočių sprendimas
4. Vieniелеktronės bazės kvantmechaniniuose skaičiavimuose	2		2				4	4	Literatūros skaitymas, praktinių modeliavimo užduočių sprendimas
5. Koreliaciniai elektroninės struktūros metodai: daugiakonfigūracinis artinys, Møller-Plesset trikdžių teorija, konfigūracijų sąveika, susietųjų klasterių metodas	4		2				6	8	Literatūros skaitymas, praktinių modeliavimo užduočių sprendimas
6. Molekulių savybių skaičiavimo principai, Koopmans'o teorema, ryšio energija, bazės superpozicijos paklaida, spektrinių parametru skaičiavimai	4		16				20	24	Literatūros skaitymas, praktinių modeliavimo užduočių sprendimas
7. Tankio funkcionalo teorijos pagrindai: Hohenberg'o-Kohn'o teoremos, elektroninis tankis, Kohn'o-Sham'o lygtys, koreliacinių funkcionalų tipai	6		8				14	16	Literatūros skaitymas, praktinių modeliavimo užduočių sprendimas
8. Molekulių dinamikos simuliacijų pagrindai: sąveikos potencialai, klasikinės judėjimo lygtys ir jų integravimo metodai, periodinės kraštinės sąlygos, termodinaminiai ansambliai, pastovios temperatūros ir pastovaus slėgio palaikymo metodai	4		0				4	4	Literatūros skaitymas
Iš viso	32		32				64	76	
Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas		Vertinimo kriterijai					
Teorijos kolokviumas I, raštu	20	Semestro vidurys		Vertinami atsakymai į pateiktus teorijos klausimus					
Teorijos kolokviumas II, raštu	20	Sesijos metu		Vertinami atsakymai į pateiktus teorijos klausimus					
Individualaus modeliavimo projekto ataskaita	60	Semestro pabaigoje		Vertinama individualaus modeliavimo projekto ataskaitos ir jos pristatymo kokybė					

Autorius (-iai)	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio Nr. ar leidinio tomas	Leidykla ar internetinė nuoroda
Privaloma literatūra				
F. Jensen	2007	Introduction Computational		Wiley

		Chemistry, 2 nd ed.		
P. Atkins, R. Friedman	2011	Molecular quantum mechanics, 5 th ed.		Oxford University Press
D. Frenkel, B. Smit	2002	Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications		Academic Press
Perla B. Balbuena, Jorge M. Seminario, Ed.	2005	Molecular Dynamics: From Classical to Quantum Methods		Elsevier Science
Papildoma literatūra				
A. Szabo, N. Ostlund	1989	Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory		Dover
J. M. Thijssen	2007	Computational Physics, 2 nd ed.		Cambridge University Press
William H. Press et al.	2007	Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, 3 rd ed.		Cambridge University Press