



STUDIJŲ DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas	Kodas
Molekuliųjų sistemų modeliavimas	

Dėstytojas / a (-ai)	Padalinys (-iai)
Koordinuojantis (-i): Kęstutis Aidas	Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
Kitas / a (-i): Žyginta Murnikova	

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) tipas
Antroji	Pasirenkamasis

Igyvendinimo forma	Vykdymo laikotarpis	Vykdymo kalba (-os)
Auditorinė	2 (pavasario) semestras	Lietuvių arba anglų

Reikalavimai studijuojančiajam	
Išankstiniai reikalavimai: Aukštoji matematika I/II, Kvantinė mechanika I/II	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		
Dalyko tikslai: - supažindinti su molekuliųjų sistemų struktūrinių, spektroskopinių ir termodinaminių parametrų modeliavimo taikant kvantinės molekulių teorijos metodus teoriniais principais bei pagrindinėmis koncepcijomis - suformuoti molekuliųjų sistemų struktūrinių, spektroskopinių ir termodinaminių parametrų modeliavimo taikant modernias kvantinės chemijos programas praktinius įgūdžius		
Dalyko (modulio) studijų rezultatai	Studijų metodai	Vertinimo metodai
Studentai įgis bendruosius molekuliųjų sistemų modeliavimo teorinius pagrindus ir susipažins su svarbiausiomis koncepcijomis.	Paskaitos, seminarai, savarankiškas darbas	Individualiai paskirto konkrečios molekulinės sistemos ir jos savybių modeliavimo projekto ataskaita, jos pristatymas ir atsakymai į klausimus žodžiu; atsakymai į teorijos klausimus raštu
Studentai gebės praktiškai spręsti cheminės fizikos problemas, pasitelkdami modernius kvantinės chemijos programinius paketus.		

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

	Paskaitos	Konsultacijos	Seminariai	Pratybos	Laboratoriniai darbai	Praktika	Visas kontaktinis darbas	Savarankiškas darbas	Savarankiškai atliekamos užduotys
1. Kurso apžvalga	1						1		
2. Kvantinės mechanikos bendrieji principai: banginė funkcija, superpozicijos principas, operatoriai kvantinėje mechanikoje, fizikinių dydžių vidurkiai, tikrinių verčių lygtys, bendroji ir stacionarioji Šriodingerio lygtys, statistinė kvantinės mechanikos interpretacija, kvantinės mechanikos postulatai, bra-ket formalizmas, variacinis principas, tikrinių verčių lygties sprendimas matricos diagonalizavimo būdu.	3						3	4	Literatūros skaitymas
3. Born-Oppenheimer'io artinys, molekulinės orbitalės, Sleiterio determinantas, tiesinė atominių orbitalių kombinacija, Slater-Condon'o taisyklės, Hartree-Fock'o lygtys, vienelektronės bazės, Roothan-Hall'o lygtys, suderintinio lauko lygčių sprendimo procedūra.	16	2					18	18	Literatūros skaitymas, modeliavimo užduočių sprendimas
4. Koreliaciniai elektroninės struktūros metodai: daugiakonfigūracinis artinys, Møller-Plesset trikdžių teorija, konfigūracijų sąveika, Hohenbergo ir Kohno teoremos, Kohn-Sham lygtys.	4	4					8	8	Literatūros skaitymas, modeliavimo užduočių sprendimas
5. Molekulių sąveikos su aplinka modeliai	2	2					4	4	Literatūros skaitymas, modeliavimo užduočių sprendimas
6. Molekulinių parametrų skaičiavimo kvantinės molekulių teorijos metodais principai: molekulių geometrijos optimizavimas, konformacinė analizė, molekulinės kompleksų sąveikos energija, bazės superpozicijos paklaida, virpesinių modų, IR sugerties ir Ramano sklaidos spektrų skaičiavimai, elektroninio sužadavimo energijų skaičiavimas, branduolių magnetinio rezonanso parametrų skaičiavimai, termodinaminiai ciklai, rūgštingumo konstantų skaičiavimai.	6	24					30	38	Literatūros skaitymas, modeliavimo užduočių sprendimas
Iš viso	32	32					64	76	

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
Individualiai paskirto konkrečios molekulinės sistemos ir jos savybių modeliavimo projekto ataskaita, jos pristatymas ir atsakymai į klausimus žodžiu	80	Egzaminų laikymo laikotarpis	Parengta modeliavimo projekto ataskaita turės būti pristatyta ir apginta. Vertinant atsižvelgiama į tokius faktorius: - Parengtos ataskaitos išsamumas ir kokybė - Atliktų modeliavimo darbų atitikimas suformuluotoms užduotims - Supratimas apie taikytų modeliavimo metodų tikslumą - Suformuluotų išvadų pagrįstumas
Atsakymai į teorijos	20	Egzaminų	Vertinamas pateiktų atsakymų į teorijos klausimus

klausimus raštu		laikymo laikotarpis	korektiškumas ir išsamumas.
-----------------	--	---------------------	-----------------------------

Autorius (-iai)	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio Nr. ar leidinio tomas	Leidykla ar internetinė nuoroda
Privaloma literatūra				
A. Szabo, N. Ostlund	1989	Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory		Dover
F. Jensen	2007	Introduction to Computational Chemistry, 2 nd ed.		Wiley
Papildoma literatūra				
P. Atkins, R. Friedman	2011	Molecular quantum mechanics, 5 th ed.		Oxford University Press
I.N. Levine	2014	Quantum chemistry, 7 th ed.		Pearson

PASTABA: Į literatūros sąrašą rekomenduojama įtraukti atvirusius mokymosi išteklius



COURSE UNIT (MODULE) DESCRIPTION

Course unit (module) title	Code
Molecular modelling	

Academic staff	Core academic unit(s)
Coordinating: Kęstutis Aidas Other: Žyginta Murnikova	Institute of Chemical Physics, Faculty of Physics, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

Study cycle	Type of the course unit
Second	Optional

Mode of delivery	Semester or period when it is delivered	Language of instruction
Face to face	2 nd semester (spring)	Lithuanian or English

Requisites	
Prerequisites: Mathematics I/II, Quantum mechanics I/II	Co-requisites (if relevant):

Number of ECTS credits allocated	Student's workload (total)	Contact hours	Individual work
5	140	64	76

Purpose of the course unit		
Course objectives: - To acquaint students with the theoretical principles and fundamental concepts of modeling the structural, spectroscopic, and thermodynamic parameters of molecular systems by means of quantum molecular theory methods. - To develop practical skills in modeling the structural, spectroscopic, and thermodynamic parameters of molecular systems through the application of modern quantum chemistry programs.		
Learning outcomes of the course unit	Teaching and learning methods	Assessment methods
Students will acquire the general theoretical foundations of molecular systems modeling and become acquainted with the principal concepts.	Lectures, seminars, self-study	A report on an individually assigned project concerning the modeling of a specific molecular system and its properties, its presentation, and oral responses to questions; written responses to theoretical questions
Students will be able to address problems of chemical physics in practice by employing modern quantum chemistry software packages.		

Content	Contact hours							Individual work: time and assignments	
	Lectures	Tutorials	Seminars	Workshops	Laboratory work	Internship	Contact hours, total	Individual work	Tasks for individual work
1. Course overview	1						1		
2. General principles of quantum mechanics: the wave function, the principle of superposition, operators in quantum mechanics, expectation values, eigenvalue equations, the general and time-independent Schrödinger equations, the statistical interpretation of quantum mechanics, the postulates of quantum mechanics, bra-ket formalism, the variational principle, and the solution of the eigenvalue equation by matrix diagonalization.	3						3	4	Textbook reading.
3. Born–Oppenheimer approximation, molecular orbitals, Slater determinant, linear combination of atomic orbitals, Slater–Condon rules, Hartree–Fock equations, one-electron basis sets, Roothaan–Hall equations, self-consistent field procedure.	16	2					18	18	Textbook reading, problem solving.
4. Multiconfigurational approximation, Møller–Plesset perturbation theory, configuration interaction, Hohenberg–Kohn theorems, Kohn–Sham equations.	4	4					8	8	Textbook reading, problem solving.
5. Molecular solvation models.	2	2					4	4	Textbook reading, problem solving.
6. Principles of calculating molecular properties using quantum chemistry methods: optimization of molecular geometries, conformational analysis, interaction energies of molecular complexes, basis set superposition error, calculations of vibrational modes, IR absorption and Raman scattering spectra, of electronic excitation energies and of nuclear magnetic resonance parameters, thermodynamic cycles, calculation of acidity constants.	6	24					30	38	Textbook reading, problem solving.
Total	32	32					64	76	

Assessment strategy	Weight %	Deadline	Assessment criteria
A report on an individually assigned project concerning the modeling of a specific molecular system and its properties, its presentation, and responses to questions.	80	During examination period	The report must be presented and defended. The evaluation will take into account the following factors: • The thoroughness and quality of the prepared report • The correspondence of the performed modeling work to the formulated tasks • The understanding the strengths and weaknesses of the applied electronic structure methods • The justification of the formulated conclusions

Written examination	20	During examination period	The correctness and thoroughness of the submitted answers to theoretical questions will be evaluated.
---------------------	----	---------------------------	---

Author (-s)	Publishing year	Title	Issue of a periodical or volume of a publication	Publishing house or web link
Required reading				
A. Szabo, N. Ostlund	1989	Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory		Dover
F. Jensen	2007	Introduction to Computational Chemistry, 2 nd ed.		Wiley
Recommended reading				
P. Atkins, R. Friedman	2011	Molecular quantum mechanics, 5 th ed.		Oxford University Press
I.N. Levine	2014	Quantum chemistry, 7 th ed.		Pearson

NOTE: Including Open Educational Resources in the reading list is recommended