

ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»
ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ТВЕРДОТІЛЬНОЇ ЕЛЕКТРОНИКИ ТА ІНФОРМАЦІЙНОЇ
БЕЗПЕКИ



«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Проректор з наукової роботи
/Студеняк І.П./
_____ 2020 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

МЕТОДИ РОЗРАХУНКІВ ТА МОДЕЛЮВАННЯ У ФІЗИЦІ ТВЕРДОГО
ТІЛА

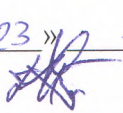
Рівень вищої освіти	третій (освітньо-науковий)
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	105 Прикладна фізика і наноматеріали
Освітня програма	Прикладна фізика і наноматеріали
Статус дисципліни	вибіркова
Мова навчання	українська

Робоча програма навчальної дисципліни «**Методи розрахунків та моделювання у фізиці твердого тіла**» для здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії галузі знань **10 Природничі науки спеціальності 105 Прикладна фізика і наноматеріали** освітньої програми **Прикладна фізика і наноматеріали**.

Розробники: Різак В.М., професор, доктор-фізико математичних наук, завідувач кафедри твердотільної електроніки та інформаційної безпеки; Чобаль О.І., к. ф.-м. н., доцент кафедри ТЕІБ


Робочу програму розглянуто та затверджено на засіданні кафедри *прикладної фізики*

протокол № 1 від «23» вересня 2020 р.

Завідувач кафедри  Небола І.І.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

протокол № 1 від «23» вересня 2020 р.

Голова науково-методичної комісії  Карбованець М.І.

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Найменування показників	Розподіл годин за навчальним планом	
	Денна форма навчання	Заочна форма навчання
Кількість кредитів ЄКТС – 7	Рік підготовки:	
Загальна кількість годин – 210	1	1
Кількість модулів – 2	Семестр:	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 3 самостійної роботи аспіранта – 4	1,2	1,2
	Лекції:	
	40	16
	Практичні (семінарські):	
	44	8
Вид підсумкового контролю: залік, екзамен	Лабораторні:	
Форма підсумкового контролю: усна	Самостійна робота:	
	126	186

2. МЕТА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Мета курсу – оволодіння аспірантами основними фундаментальними уявленнями про сучасні методики розрахунків та принципи моделювання у галузі фізики твердого тіла, а також формування в аспірантів навиків практичної роботи з відповідними програмними пакетами.

Завдання курсу "Методи розрахунків та моделювання у фізиці твердого тіла" – оволодіння основними методами і принципами деяких спеціальних розрахункових методів та моделювання у фізиці конденсованого стану, які є необхідними для використання сучасних програмних пакетів для розрахунку електронної та атомної структури матеріалів, а також вільного розуміння наукових публікацій під час виконання дисертаційного дослідження.

Фокус навчальної дисципліни: зміст та матеріал навчальної дисципліни стосується аналізу сучасних розрахункових методів у галузі фізики твердого тіла, який орієнтує на актуальні питання та можливості моделювання структури та властивостей матеріалів, в рамках яких можлива подальша професійна та наукова кар'єра у галузі фізики конденсованого стану.

Місце дисципліни в структурі освітньо-наукової програми: спецкурс відноситься до дисциплін нормативної частини циклу професійної підготовки, за результатами яких здобувачі здають залік та виконують навчальний процес по спеціальності 105 "Прикладна фізика і наноматеріали".

Відповідно до освітньо-наукової програми, вивчення дисципліни «**Методи розрахунків та моделювання у фізиці твердого тіла**» сприяє формуванню у здобувачів вищої освіти таких компетентностей:

– **інтегральна компетентність**: здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної та дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та професійної практики.

– **загальні компетентності**: здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК-1); навички використання новітніх інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК-2); здатність проведення самостійних досліджень на сучасному рівні (ЗК-3); здатність до пошуку, обробки на аналізі інформації з різних джерел (ЗК-4); здатність генерувати нові ідеї (креативність) (ЗК-5); здатність комунікації на фахову тематику з нефхівцями (ЗК-10).

– **фахові компетентності**: здатність застосовувати фізичні знання для систематизації різноманітних пов'язаних фактів і явищ (ФК-1); здатність визначати завдання фізичного дослідження (ФК-2); здатність вирізняти із накопичених спостережень відтворювані експериментальні факти (ФК-3); здатність створювати та порівнювати між собою фізичні та математичні моделі фізичних об'єктів, процесів та явищ (ФК-4); здатність оцінювати моделі з точки зору їх відповідності фізичним об'єктам процесам та явищам, для пояснення яких застосовуються дані моделі (ФК-5); вміння здійснювати комп'ютерне моделювання фізичних процесів, у тому числі із застосуванням існуючого програмного забезпечення (ФК-6); володіння експериментальними методиками дослідження наноструктурованих матеріалів (ФК-7); знайомство з інформаційними технологіями та електронікою (ФК-8); володіння теоретичними методами, що застосовуються для дослідження низьковимірних систем і наноматеріалів (ФК-10).

3. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Відповідно до освітньо-наукової програми, вивчення навчальної дисципліни «**Методи розрахунків та моделювання у фізиці твердого тіла**» повинно забезпечити досягнення здобувачами вищої освіти таких програмних результатів навчання (ПРН):

Програмні результати навчання	Шифр ПРН
Знати сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі фізики, прикладної фізики та суміжних галузей знань.	ПРН 1.1.
Знати фундаментальні праці провідних зарубіжних вчених та наукових шкіл у галузі дослідження.	ПРН 1.2.
Вміти формулювати загальну методологічну базу власного наукового	ПРН 2.2.

дослідження.	
Вміти проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, які приводять до отримання нових знань.	ПРН 2.3.
Вміти формулювати наукову проблему з огляду на стан її наукової розробки та сучасні наукові тенденції.	ПРН 2.5.
Вміти формулювати робочі гіпотези та моделі досліджуваної проблеми.	ПРН 2.6.
Вміти аналізувати наукові праці в галузі прикладної фізики, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання.	ПРН 2.7.

Очікувані результати навчання, які повинні бути досягнуті здобувачами освіти після опанування навчальної дисципліни «**Методи розрахунків та моделювання у фізиці твердого тіла**»:

Очікувані результати навчання з дисципліни	Шифр ПРН
Знати сучасні методики розрахунків та принципи моделювання у галузі фізики твердого тіла	ПРН 1.1.
Знати теоретичні підходи та наближення, які використовують емпіричні, напівемпіричні та <i>ab initio</i> методи розрахунків	ПРН 1.2
Вміти обґрунтувати доцільність теоретичних та розрахункових робіт у потрібному наближенні під час дослідження структури та властивостей твердих тіл і наноматеріалів	ПРН 2.2
Вміти розраховувати основні характеристики просторової та електронної структури, а також динамічних властивостей створених моделей	ПРН 2.3
Володіти методами побудови моделей, що описують різні фізичні явища у твердих тілах та наноматеріалах	ПРН 2.5
Вміти генерувати нові ідеї при вирішенні дослідницьких і практичних задач в області фізики конденсованого стану	ПРН 2.6
Вміти застосовувати фізичні теорії для опису та інтерпретації результатів експериментальних досліджень	ПРН 2.6
Вміти аналізувати наукову літературу щодо сучасних теоретичних методів розрахунку та актуальних моделей у галузі фізики конденсованого стану	ПРН 2.7

4. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ

РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Засоби оцінювання та методи демонстрування результатів навчання

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання з навчальної дисципліни є:

- поточний контроль успішності,
- модульний контроль,
- підсумковий контроль.

Форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання

Форми поточного контролю:

- вибіркове усне опитування;
- фронтальне стандартизоване усне та/або письмове опитування за основними питаннями теми заняття;
- експрес-опитування;
- тестування;

- реферативні повідомлення та їх обговорення;
- перевірка якості виконання завдань для самостійної роботи, зокрема за конспектами матеріалів;
- оцінювання якості та повноти виконання завдань модульної контрольної роботи.

Форма модульного контролю: виконання модульної контрольної роботи, результати якої оцінюються за 100-бальною шкалою за кожний модуль.

Форми підсумкового семестрового контролю: залік, екзамен. До заліку або екзамену допускаються аспіранти, які відпрацювали пропущені заняття і виконали модульні контрольні роботи.

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 1)

Поточне оцінювання та самостійна робота					Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4	T5	70	100
7	7	7	7	2		

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 2)

Поточне оцінювання та самостійна робота					Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4	T5	70	100
2	7	7	7	7		

Оцінювання окремих видів навчальної роботи з дисципліни

Вид діяльності здобувача вищої освіти	Модуль 1		Модуль 2	
	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)
Практичні (семінарські) заняття	11	30	11	30
Лабораторні заняття (допуск, виконання та захист)		-		
Комп'ютерне тестування при тематичному оцінюванні		-		
Письмове тестування при тематичному оцінюванні				
Презентація		-		
Реферат		-		
Есе		-		
Модульна контрольна робота		70		70
Разом	11	100	11	100

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи

Модульна контрольна робота проводиться у письмовій формі шляхом відповідей на питання тестових завдань. Кожна правильна відповідь оцінюється певною кількістю балів. Максимальна кількість балів за кожний модуль становить 100 балів. Мінімальна кількість балів, за якої робота вважається виконаною становить 60 балів.

Критерії оцінювання підсумкового семестрового контролю

Підсумковий семестровий контроль з дисципліни «**Методи розрахунків та моделювання у фізиці твердого тіла**» здійснюється у формі заліку та екзамену.

Залік проводиться в усній формі шляхом співбесіди. Результати заліку оцінюються за двобальною шкалою: „зараховано, „незараховано”.

Підсумкова оцінка " зараховано"/"не зараховано" визначається наступними критеріями:

- " зараховано" - якщо аспірант достатньо чітко і грамотно відповідає на питання в межах матеріалу викладеного у рамках лекційних занять, може показати та обґрунтувати взаємозв'язок різних частин матеріалу, пройденого у межах матеріалу навчальної дисципліни; демонструє здатність до мислення, при відповіді на питання розмірковує, спираючись на отримані у рамках курсу знання, не допускає істотних неточностей у відповіді, правильно вибудовує логіку вирішення типових завдань;

- "незараховано" - якщо аспірант викладає основні питання недостатньо чітко або допускає істотні помилки при їх викладі, не може пояснити зв'язків у рамках викладеного матеріалу, аспірант не знає значної частини програмного матеріалу, не може дати точних визначень понять, пройдених у рамках курсу, дає розпливчаті формулювання і не володіє в належній мірі термінологією, плутається при відповіді на додаткові питання, не володіє прийомами вирішення типових завдань.

Екзамен проводиться в усній формі шляхом співбесіди. Результати екзамену оцінюються за чотирибальною шкалою: „відмінно”, „добре”, „задовільно”, „незадовільно”.

Оцінка „відмінно” (А; 90-100) виставляється в тому разі, коли аспірант бездоганно оволодів всіма розділами програми, дав глибокі, чіткі і вичерпні відповіді на всі основні і додаткові запитання, виявив розуміння фізичної суті програмового матеріалу, вільне володіння фактичним матеріалом та відповідним математичним апаратом, вміння грамотно обробляти результати експериментальних вимірювань з метою отримання заданої точності отриманих даних, кваліфіковано використовувати набуті знання для розв'язання конкретних практичних задач.

Оцінка „добре” (В, С; 74-89) виставляється тоді, коли аспірант виявив повне знання і розуміння програмового матеріалу, добре оволодів математичним апаратом курсу, може використовувати набуті знання в практичній діяльності, дав вичерпні відповіді на всі запитання, але під час відповіді допускав окремі нечіткі формулювання і незначні неточності.

Оцінка „задовільно” (D, E; 60-73) виставляється в тому разі, коли аспірант в основному знає і розуміє фактичний матеріал курсу, дав в основному правильні відповіді на запитання, виявив уміння розібратися в усьому матеріалі курсу, вміння використовувати відповідний математичний апарат, але не може ґрунтовно пояснити окремі положення пройденого курсу, допускає неточності при використанні математичного апарату, недостатньо вміє застосовувати набуті знання для розв'язання конкретних практичних задач.

Оцінка „незадовільно” (FX, F; 1-59) виставляється тоді, коли аспірант не оволодів матеріалом даного курсу, виявив суттєві прогалини в знаннях основного програмового матеріалу, коли він під час відповіді на запитання виявив нерозуміння фізичної сутності основних понять та термінів навчальної дисципліни, допускає плутанину, слабо володіє математичним апаратом, не може застосовувати набуті знання для розв'язування конкретних практичних задач, тобто виявив відсутність мінімально необхідної кількості знань з даного курсу.

За бажанням аспіранта результуюча підсумкова оцінка може бути визначена як інтегрована оцінка засвоєння всіх тем дисципліни і кількісно дорівнює середньому арифметичному балів, отриманих за кожний модуль.

Переведення результатів, отриманих за 100-бальною шкалою оцінювання в національну 4-х бальну та шкалу за системою ECTS здійснюється за наступною схемою:

Оцінка за шкалою балів	Залік	ECTS	
		Оцінка	Характеристика
90-100	зараховано	A	відмінно
82-89		B	добре
74-81		C	добре
64-73		D	задовільно
60-64		E	задовільно
35-59	незараховано	FX	незадовільно з можливістю перескладання
1-34		F	незадовільно з обов'язковим повторним навчанням

Аспірант, який отримав за результатами підсумкового контролю оцінку «незараховано» або «незадовільно з обов'язковим повторним навчанням» (1-34 балів, F), зобов'язаний пройти повторний курс вивчення дисципліни (під час додаткового семестру) і скласти залік або екзамен.

Результати підсумкового контролю знань вносяться до відомості обліку успішності.

5. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

5.1. Зміст навчальної дисципліни

МОДУЛЬ 1. НЕЕМПІРИЧНІ МЕТОДИ РОЗРАХУНКІВ ФТТ

Тема 1. Види, можливості та обмеження сучасних розрахункових методів ФТТ

Електронна структура системи

Кристали, наночастинки та молекули

Зонні методи

Кластерні методи

Огляд основних розрахункових пакетів ФТТ

Тема 2. Електронні стани. Рівняння Хартрі-Фока

Гамільтоніан кристалу. Адіабатичне наближення.

Електронні стани. Багатоелектронна проблема.

Наближення самоузгодженого поля. Рівняння Хартрі-Фока.

Базисні функції: плоскі хвилі, орбіталі Слетера, орбіталі Гауса, числові орбіталі. Квантові методи Монте-Карло.

Тема 3. *Ab initio* розрахунки статичних і динамічних властивостей молекулярних моделей

Оптимізація геометрії молекул та комплексів.

Методи багатовимірної оптимізації для пошуку оптимальної геометрії

Коливання молекул. Силова стала. ІЧ, КР спектри.

Ангармонізм коливань. Енергії нульових коливань (ZPE). Термохімічні розрахунки.

Першопринципні розрахунки матриці силових постійних.

Аналіз власних векторів коливань атомів.

Тема 4. Теорія функціоналу густини Метод псевдопотенціалу

Хвильові функції для багатоелектронних систем.

Теорія функціоналу густини – основні положення та переваги.

Теорія Томаса-Фермі. Теорія функціонала густини в формулюванні Хоенберга-Кона.

Самоузгоджене рівняння Кона-Шема.

Наближення для обмінного потенціалу: наближення локальної густини та загальне градієнтне наближення.

Загальна теорія побудови псевдопотенціалу

Критерії вибору псевдопотенціалу

Різні види псевдопотенціалів

МОДУЛЬ 2. ЕМПІРИЧНІ, НАПІВЕМПІРИЧНІ РОЗРАХУНКОВІ МЕТОДИ ФТТ ТА МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА

Тема 1. Емпіричні потенціали

Парні потенціали (Ленарда-Джонса, Морзе, Бекінгема та інші), їх переваги та недоліки.

Потенціал зануреного атома.

Багаточастинкові потенціали (Стіллінгера – Вебера, Абеля-Терсоффа-Бреннера)

Потенціали для моделювання макромолекул

Тема 2. Напівемпіричні методи

Метод молекулярних орбіталей Хюккеля

Розширений метод Хюккеля

Метод сильного зв'язку

Тема 3. Класична молекулярна динаміка Неемпірична молекулярна динаміка

Загальна структура програми МД моделювання

Початкові умови. Граничні умови (періодичні). Похибки при інтегруванні

Схема Верле. Мікроканонічний та канонічний ансамблі

Вивід системи на рівновагу: термостати Берендсена, Гаусса, Нозе-Хувера, Ланжевена.

Моделювання ізобаричних систем

Визначення температури, тиску та інших термодинамічних величин.

Квантовий метод молекулярної динаміки

Наближення Бора-Опенгеймера

Метод Кар-Паріелло

Тема 4. Застосування молекулярного моделювання

Моделювання динаміки взаємодії кластерів з поверхнею кристалів

Основні принципи моделювання наноструктур та біологічних макромолекул

Методи аналізу та моделювання просторової структури білків

5.2. Структура навчальної дисципліни

Денна форма навчання

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин	
	Форма навчання: денна	
	Р	О
		у тому числі

		лекції	практичні (семінарські)	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота
Модуль 1						
Тема 1. Види, можливості та обмеження сучасних розрахункових методів ФТТ	24	4	4			16
Тема 2. Електронні стани. Рівняння Хартрі-Фока	24	4	6			14
Тема 3. Ab initio розрахунки статичних і динамічних властивостей молекулярних моделей	26	6	6			14
Тема 4. Теорія функціоналу густини. Метод псевдопотенціалу	26	6	6			14
Модульна контрольна робота	2					
Разом за модуль	100	20	22			58
Модуль 2						
Тема 1. Емпіричні потенціали	26	4	4			18
Тема 2. Напівемпіричні методи	28	4	6			18
Тема 3. Класична молекулярна динаміка. Неемпірична молекулярна динаміка	28	6	6			16
Тема 4. Застосування молекулярного моделювання	28	6	6			16
Модульна контрольна робота	2					
Разом за модуль	110	20	22			68
Разом за семестр	210	40	44			126

Заочна форма навчання

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Форма навчання: заочна					
	Усього	у тому числі				
лекції		практичні (семінарські)	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота	
Модуль 1						
Тема 1. Види, можливості та обмеження сучасних розрахункових методів ФТТ	24	2				22
Тема 2. Електронні стани. Рівняння Хартрі-Фока	26	2	2			22
Тема 3. Ab initio розрахунки статичних і динамічних властивостей молекулярних моделей	26	2	2			22
Тема 4. Теорія функціоналу густини.. Метод псевдопотенціалу	24	2				22
Модульна контрольна робота	2					
Разом за модуль	100	8	4			88
Модуль 2						
Тема 1. Емпіричні потенціали	28	2	2			24
Тема 2. Напівемпіричні методи	28	2	2			24
Тема 3. Класична молекулярна динаміка Неемпірична молекулярна динаміка	28	2				26

Тема 4. Застосування молекулярного моделювання	26	2			24
Модульна контрольна робота	2				
Разом за модуль	110	8	4		98
Разом за семестр	210	16	8		186

5.3. Теми практичних (семінарських, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість Годин	
		Денна	Заочна
1	Вступне заняття. Завантаження і встановлення програмного комплексу GAMESS (US).	4	2
2	Налаштування паралельної роботи. Створення тестових вхідних файлів. Способи візуалізації вихідних файлів.	6	
3	Розрахунок електронної структури досліджуваного кластеру обмеженим методом Хартрі-Фока	6	2
4	Розрахунок електронної структури досліджуваного кластеру необмеженим методом Хартрі-Фока. Електронні кореляції.	6	
5	Першопринципні розрахунки коливальних спектрів досліджуваного кластеру	4	
6	Дослідження електронної структури складних молекулярних комплексів напівемпіричними методами	6	
7	Моделювання фазових переходів методами молекулярної динаміки	6	2
8	Моделювання атомарно-чистої поверхні кристалів в середовищі Quantum ESPRESSO	6	2
Разом		44	8

5.4. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денна	заочна
1.	Енергетична діаграма молекулярних орбіталей	4	14
2.	Розширені базисні набори: розщеплені, поляризовані, дифузні	10	14
3.	Кореляційно узгоджені базисні функції	10	14
4.	Обмеженість одностерміантного наближення. Енергія електронної кореляції.	10	14
5.	Багатоконфігураційні методи самоузгодженого поля.	10	14
6.	Метод конфігураційної взаємодії. Метод зв'язаних кластерів.	10	14
7.	Теорія збурень у квантовій механіці. Методи Меллера-Плессе (MP2, MP4).	10	14
8.	Термодинамічні функції молекул. Енергія нульових коливань і теплова енергія.	10	14
9.	Обчислення термохімічних характеристик молекул	10	14
10.	Теорія теплоємності газів: вклад у теплоємність поступальних, обертальних та коливальних ступенів вільності	6	14
11.	Сканування поверхні потенціальної енергії	10	14
12.	Моделювання збуджених станів молекул	10	14

13.	Принцип «розділяй і володарюй» в методі лінійного скейлінгу	10	8
14.	Пряме обчислення одночастинкової матриці щільності в методі лінійного скейлінгу	6	10
	Разом	126	186

6. ІНСТРУМЕНТИ, ОБЛАДНАННЯ ТА ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ, ВИКОРИСТАННЯ ЯКИХ ПЕРЕДБАЧАЄ НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА

Технічні засоби: лекційний курс передбачає використання технічних засобів навчання, комп'ютерних проекторів.

Програмне забезпечення: GAMESS(US), ABINIT, QUANTUM ESPRESSO

7. РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА

ІНФОРМАЦІЇ Основна

література

1. R.Martin Electronic Structure. Basic theory and practical methods. Cambrige 2004
2. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. Т.1,2. М.: Мир, 1983.
3. Ашкрофт А., Мермин Дж. Физика твердого тела. Т.1,2. М.: Мир, 1979,
4. Д.В. Хеерман. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990. 176 с.
5. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. Изд-во Московского университета: М., 2001. 519 с
6. Х. Гулд, Я.Тобочник Компьютерное моделирование в физике. Москва, Мир,1990, т.1-2
7. В.Кон Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности.
– Успехи физ. наук, Том 172, №3.
8. Шпак А.П., Куницький Ю.А., Федоров В.Є. Електронна структура та властивості твердих тіл. Київ, 2004
9. F. Jensen. Introduction to Computational Chemistry. Wiley, 2006, 624 p

Допоміжна література

1. Слета Л.А., Иванов В.В. Квантовая химия. –Харьков: Фолио, 2007. -476 с.
2. Боженко К.В. Основы квантовой химии М.: Российский университет дружбы народов, 2010.- 128 с.
3. Кларк Т. Компьютерная химия. -М.: Мир, 1990.- 381 с.
4. А.П. Шпак, Ю.А. Куницкий,В.Л. Карбовский. Кластерные и наноструктурные материалы. К.: Академперіодика, 2001.
5. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения.. -М.: Мир,1983.-396 с.
6. Жоголев Д.А. Использование гауссовых функций в квантовохимических расчетах молекул. Физика молекул, 1975, вып. 1. с. 27–46
7. Шевченко С.М. Молекула в пространстве. Л.: Химия, 1986. 144 с.
8. Хобза П., Заградник Р. Межмолекулярные комплексы: Роль вандерваальсовых систем в физической химии и биодисциплинах. М.: Мир,1989. 375 с.
9. Хельтье Х.-Д., Зиппль В., Роньян Д., Фолькерс Г.. Молекулярное моделирование

Теория и практика. - М.:БИНОМ, 2010. - 318 с.
Leach A.R.. Molecular Modeling: Principles and Applications - Pr