



Національна академія наук України
Інститут проблем матеріалознавства
ім. І.М. Францевича



Силабус (робоча програма) навчальної дисципліни

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ РОЗРАХУНКИ ВЛАСТИВОСТЕЙ МАТЕРІАЛІВ QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS OF MATERIALS PROPERTIES

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>третій (освітньо-науковий)</i>
Галузь знань	10 - Природничі науки
Спеціальність	102 - Хімія
Освітня програма	Фізична хімія неорганічних матеріалів - Physical chemistry of inorganic materials;
Статус дисципліни	дисципліна вільного вибору
Форма навчання	денна (очна), он-лайн/офф-лайн
Рік підготовки, семестр	<i>2 курс навчання, осінній семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>3 кредити ECTS, 90 годин</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>залік</i>
Розклад занять	<i>лекція – раз на тиждень (32 години); самостійна робота 58 год., у тому числі на виконання індивідуальних/домашніх завдань 28 год</i>
Мова викладання	<i>українська</i>
Інформація про викладачів	<i>к.х.н., доц., зав. від. Васільєв Олександр Олексійович, o.vasiliev@ipms.kyiv.ua</i>
Розміщення курсу	Google Workspace for Education; доступ за запрошенням викладача

Програма навчальної дисципліни

1. Опис освітньої компоненти, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Застосування комп'ютерних алгоритмів для атомістичного моделювання набуває все більш широкого вжитку для пришвидшення відкриття нових матеріалів, розвідки їх властивостей, зокрема хімічних, прототипування умов отримання та особливостей поведінки за різних умов та у різних середовищах. З їх використанням шлях від ідеї до ринку може бути скорочено з десятиліть до років і навіть місяців. Активний розвиток атомістичних розрахунків за принципами квантової механіки за теорією функціоналу електронної густини зробив можливим таке використання комп'ютерних алгоритмів для прогнозування властивостей простих систем з точністю зіставною з експериментом. Революційний розвиток методів машинного навчання, в тому числі штучних нейронних мереж, та їх адаптація до проблем матеріалознавства робить подібні розрахунки доступними для

систем недоступних раніше розмірів та рівня складності. Тому розрахункові зусилля займають все більш вагоме місце у сталій дослідницькій діяльності провідних матеріалознавчих лабораторій та підприємств світу. Разом з тим, "проривну" діяльність у галузі (стартапи) вже зараз не можливо уявити без застосування інформатики матеріалів.

Предмет освітньої компоненти - основні теоретичні засади та практичні реалізації найбільш поширених методів розрахунку фізико-хімічних властивостей матеріалів із застосуванням положень квантової-механіки та елементів машинного навчання.

Метою освітньої компоненти є формування у здобувачів вищої освіти (з.в.о.) рівня PhD базові знання та вміння необхідні для ефективного аналізу передової наукової літератури в галузі розрахунку та прогнозування властивостей матеріалів з принципів квантової механіки (квантово-хімічні розрахунки), застосування атомістичного моделювання та розрахунків для супроводу власних експериментальних робіт з розробки та впровадження нових матеріалів, ефективного використання у власних розробках розрахункових відомостей, накопичених світовою науковою спільнотою в галузі атомістичного моделювання матеріалів у відкритих базах даних, а також формування наступних компетентностей:

Інтегральна компетентність:

Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі хімії та хімічного матеріалознавства, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань, оволодіння методологією наукової та науково-педагогічної діяльності, проведення самостійного наукового дослідження, результати якого мають наукову новизну, теоретичне та практичне значення.

Загальні компетентності:

ЗК01. Здатність до освоєння і системного аналізу через наукове сприйняття і критичне осмислення нових знань в предметній та міжпредметних галузях.

ЗК02. Здатність до критичного аналізу і креативного синтезу нових ідей, які можуть сприяти в академічному і професійному контекстах технологічному, соціальному та культурному прогресу суспільства, базованому на знаннях.

ЗК03. Здатність до розв'язування складних завдань, розуміння відповідальності за результат роботи з урахуванням бюджетних витрат та персональної відповідальності.

ЗК04. Здатність до спілкування з колегами, академічною аудиторією та громадськістю як на національному, так і на міжнародному рівні для реалізації інноваційного проекту або вирішення наукової проблеми.

ЗК05. Здатність до самовдосконалення, адаптації та дії в нових ситуаціях, креативність, прагнення працювати самостійно.

ЗК09. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

Фахові компетентності:

ФК01. Наявність глибоких обґрунтованих знань в галузі фізичної хімії, детальне розуміння підходів до аналізу інформації і застосування її до створення новітніх матеріалів,

вміння проводити експериментальні і теоретичні дослідження у галузі хімії та хімічного матеріалознавства.

ФК02. Знання сучасного стану і напрямів розвитку хімії неорганічних матеріалів на міжнародному, міждержавному, державному та регіональному рівнях.

ФК03. Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі хімії з урахуванням міжгалузевих зв'язків для забезпечення потреб у високоефективних матеріалах, енерго- та ресурсозберігаючих технологіях.

ФК04. Здатність реалізувати проекти, включаючи власні дослідження, які дають можливість переосмислити наявне та створити нове цілісне знання та/або професійну практику і розв'язання значущих соціальних, наукових, культурних, етичних та інших проблем хімії, зокрема, фізичної хімії неорганічних матеріалів.

ФК08. Здатність до постійного самовдосконалення у професійній сфері, планування та реалізації експерименту, відповідальність за навчання інших при проведенні науково-педагогічної діяльності та наукових досліджень в галузі хімії.

ФК09. Розуміння теоретичних засад, що лежать в основі методів досліджень стану навколишнього середовища, методології проведення теоретичних і експериментальних досліджень.

ФК10. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

Програмні результати навчання. Після засвоєння освітньої компоненти аспіранти мають продемонструвати такі результати навчання:

РН01. Проявляти наукові погляди та підходи при проведенні експертного аналізу наукових даних, оцінювати вплив фізико-хімічних факторів на властивості матеріалів.

РН02. Володіти концептуальними та методологічними знаннями в галузі хімії та бути здатним застосовувати їх до професійної діяльності на межі предметних галузей.

РН03. Інтегрувати існуючі методики та методи досліджень та адаптувати їх для розв'язання наукових завдань при проведенні дисертаційних досліджень.

РН05. Визначити закономірності та особливості поведінки матеріальних об'єктів.

РН08. Спланувати та реалізувати на практиці оригінальне самостійне наукове дослідження, яке має суттєву новизну, теоретичну і практичну цінність та сприяє розв'язанню соціальних, наукових та інших проблем.

РН11. Використовувати сучасні інформаційні джерела національного та міжнародного рівня для оцінки стану вивченості об'єкту досліджень і актуальності наукової проблеми.

РН14. Вміти доступно, на високому науковому рівні доносити сучасні наукові знання та результати досліджень до професійної та непрофесійної аудиторії.

РН16. Описувати результати наукових досліджень у фахових публікаціях у вітчизняних та закордонних спеціалізованих виданнях, в тому числі, у внесених до наукометричних баз Scopus, Web of Science та аналогічних.

РН19. Дотримуватись етичних норм, враховувати авторське право та норми академічної доброчесності при проведенні наукових досліджень, презентації їх результатів та у науково-педагогічній діяльності.

РН20. Використовувати набуті знання та компетенції з хімії для реалізації оригінального рішення, направлено на розв'язання конкретної науково-технічної проблеми.

PH22. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.

2. Місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою

Перелік освітніх компонент, знань та умінь, володіння якими необхідні аспіранту для успішного засвоєння освітньої компоненти:

Пререквізити:	
Основи матеріалознавства	Знання основ матеріалознавства як міждисциплінарної галузі науки, що вивчає залежність між складом, структурою та властивостями матеріалів у взаємозв'язку з технологією їх отримання, умовами експлуатації та вартістю та вміння аналізувати зазначені взаємозв'язки
Вища математика	Знання основ лінійної алгебри, математичного аналізу, математичної статистики та вміння аналізувати вирази та залежності, описані за методологією зазначених розділів
Основи фізики твердого тіла	Знання будови твердих тіл на атомному рівні, її впливу на вібраційні, електронні, механічні властивості
Фізична хімія	Знання квантово-механічних засад будови речовини, законів термодинаміки
Інформатика	Знання операційних систем на рівні впевненого користувача, базові вміння користування командним рядком, програмування на мовах високого рівня абстракції
Постреквізити:	
Наукова складова	Планування і виконання розрахункових досліджень з використанням сучасних методів та методик атомістичного моделювання матеріалів, критичний аналіз результатів теоретичних досліджень.

3. Зміст освітньої компоненти

Тема 1. Основи атомістичної інформатики матеріалів

- Основні поняття, мета та задачі атомістичної інформатики матеріалів, її міждисциплінарний характер
- Огляд основних опорних понять з дотичних дисциплін: фізичного матеріалознавства, фізики твердого тіла, хімії, математики, інформатики.

Тема 2. Базовий інструментарій атомістичної інформатики матеріалів

- Пакетний менеджер conda;
- Програмне середовище Jupyter Notebook;
- Базові поняття та основи роботи з мовою програмування Python.

Тема 3. Програмне середовище для атомістичного моделювання Atomic Simulation Environment (ASE)

- Основний функціонал та можливості ASE;
- Базові об'єкти атомістичних моделей ASE: Atom та Atoms;

- Створення атомістичних моделей в ASE, основні операції з ними (геометричні перетворення, хімічне конструювання, візуалізація).

Тема 4. Основні теоретичні положення теорії функціоналу електронної густини (DFT)

- Рівняння Шрьодінгера для багатьох тіл та основні методи його наближеного вирішення;
- Теорія функціоналу електронної густини;
- Розрахунок самоузгодженого поля;
- Можливості та обмеження щодо застосування DFT.

Тема 5. Основи роботи з пакетом програм Quantum Espresso

- Загальні відомості про пакет програм Quantum Espresso;
- Інтеграція Quantum Espresso та ASE;
- Ключові параметри розрахунку та вибір їх оптимальних значень;
- Підготовка вхідних даних та здійснення розрахунку.

Тема 6. Рівноважна структура матеріалів з DFT: теоретичні основи

- Наближення «фіксованих ядер» Борна-Оппенгайма;
- Сили, що діють на атоми;
- Мінімізація сил, що діють на атоми методом градієнтного спуску;
- Типи структурної мінімізації.

Тема 7. Оптимізація структури матеріалу у Quantum Espresso. Розрахункові спектри дифракції X-променів (рентгенівської дифракції)

- Підготовка вхідних даних для оптимізації структури з Quantum Espresso;
- Здійснення оптимізації та аналіз її результатів;
- Генерування теоретичних спектрів рентгенівської дифракції для оптимізованих структур (ASE).

Тема 8. Розрахунок термодинамічних параметрів утворення та змішування твердих речовин з DFT : теоретичні основи

- Енергії (ентальпії) утворення;
- Енергії (ентальпії) змішування та тверді розчини;
- Методи моделювання структурних конфігурацій ідеальних та упорядкованих твердих розчинів.

Тема 9. Розрахунок термодинамічних параметрів утворення та змішування твердих речовин у Quantum Espresso

- Підготовка вхідних даних для розрахунку енергій утворення;
- Генерація структурних конфігурацій твердих розчинів з пакетом програм icet;
- Структурна оптимізація конфігурацій;

Тема 10. Вібраційні термодинамічні властивості з DFT: теоретичні основи

- Теорія збурення функціоналу електронної густини;
- Дисперсія фононів по зоні Бріллюена – опорні дані для інфра-червоної та раманівської спектроскопії;
- Густина фононних станів;
- Температурні залежності теплоємності, ентальпії речовини та вібраційної ентропії.

Тема 11. Розрахунок вібраційних термодинамічних властивостей з Quantum Espresso та thermos_pw

- Підготовка вхідних даних для розрахунку за теорією збурення електронної густини;
- Візуалізація та аналіз результатів розрахунку фононного спектру;
- Розрахунок температурних залежностей вібраційних термодинамічних властивостей;

Тема 12. Поза основами: складні розрахунки з DFT

- Молекулярна динаміка;
- Електронні властивості та зонна будова речовин;
- Діелектричні та магнітні властивості.

Тема 13. Методи машинного навчання в матеріалознавстві

- Базові принципи машинного навчання;
- Загальний огляд та класифікація методів машинного навчання;
- Застосування класичного машинного навчання в атомістичному моделюванні матеріалів;
- Застосування нейронних мереж (глибокого машинного навчання) в атомістичному моделюванні матеріалів.

Тема 14. Атомістичне моделювання твердих розчинів з використанням класичного машинного навчання

- Моделі кластерного розкладу;
- Метод машинного навчання LASSO для лінійної регресії у моделях кластерного розкладу;
- Застосування машинного навчання для побудови моделей кластерного розкладу з програмним модулем icet;
- Підготовка набору тренування-валідації з DFT;
- Тренування моделі та оцінка її ефективності;
- Застосування моделі (енергії змішування та упорядкування в твердих розчинах).

Тема 15. Міжатомні потенціали машинного навчання для атомістичного моделювання складних систем значного розміру

- Нейронні мережі як міжатомні потенціали;
- Продуктивні високоточні міжатомні потенціали машинного навчання з пакетом програм NequIP;
- Підготовка набору тренування-валідації з DFT;
- Тренування моделі та оцінка її ефективності;
- Застосування моделі (швидка оптимізація структури та молекулярна динаміка).

Тема 16. Відкриті масивні бази даних результатів атомістичного моделювання матеріалів

- Бази даних Materials Project, Aflow, NOMAD;
- Пошук та узагальнення інформації у базах даних (веб інтерфейс);
- Застосування вбудованих засобів машинного навчання
- Пакетне отримання даних з OPTIMADE API

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у відкритому доступі у мережі інтернет, у бібліотеці інституту, а також можуть бути надані в електронному

вигляді. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні.

Базова література:

1. Giustino F. Materials modelling using density functional theory: properties and predictions. 1st ed. Oxford: Oxford University Press; 2014.
2. Документація Jupyter Notebook: <https://jupyter-notebook.readthedocs.io/en/stable/>
3. Документація Atomic Simulation Environment: <https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>
4. Документація Quantum Espresso: https://www.quantum-espresso.org/Doc/user_guide/
5. Документація icet: <https://icet.materialsmodeling.org/>
6. Vasiliev OO. Thermodynamic Properties of Tungsten Disulfide from First Principles in Quasi-Harmonic Approximation. Powder Metall Met Ceram. 2021;59:576–84. <http://link.springer.com/10.1007/s11106-021-00185-6>
7. Vasiliev O, Vedel D, Muratov V, Mazur P, Chudinovych O, Bekenev V, et al. Synthesis of equimolar solid solution of zirconium and hafnium diborides by vacuum-thermal routes. Open Ceramics. 2023;16:100464. Available from: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2666539523001360>
8. Документація NequIP: <https://nequip.readthedocs.io/en/latest/>
9. Документація OPTIMADE API: <https://www.optimade.org/documentation>

Додаткова література:

10. Ohno K, Esfarjani K, Kawazoe Y. Computational Materials Science. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg; 2018. Available from: <http://link.springer.com/10.1007/978-3-662-56542-1>
11. Документація conda: <https://docs.conda.io/en/latest/>
12. Основи мови програмування Python: <https://www.kaggle.com/learn/python>
13. Vasiliev O, Muratov V, Mazur P, Bilyi V, Karpets M, Bekenev V, et al. Silicon in intericosahedra chains of boron carbide. Journal of the European Ceramic Society. 2022;42:5515–21. Available from: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0955221922004095>
14. Géron A. Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: concepts, tools, and techniques to build intelligent systems. Sebastopol, CA: O'Reilly Media, Inc; 2019.
15. База даних Materials Project: <https://materialsproject.org/>
16. База даних Aflow: <https://www.aflowlib.org/>
17. База даних NOMAD: <https://nomad-lab.eu/nomad-lab/>
18. Andersen CW, Armiento R, Blokhin E, Conduit GJ, Dwaraknath S, Evans ML, et al. OPTIMADE, an API for exchanging materials data. Sci Data. 2021;8:217.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Передбачено комплексний підхід, що поєднує лекції та розширене опрацювання матеріалу через самостійну роботу. При читанні лекцій застосовується ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені в Google Workspace for Education. Після

кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

6. Самостійна робота

Самостійна робота включає повторення лекційного матеріалу та виконання інтерактивних тестових завдань, результативне вирішення яких вимагає роботи з рекомендованою літературою. Це дозволяє розширити та поглибити знання з дисципліни та забезпечити підготовку до заліку.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Відвідування занять, які можуть проводитись як он-лайн, так і офф-лайн, є обов'язковим. У випадку відсутності на занятті аспіранти зобов'язані повідомити викладача заздалегідь і надати документальне підтвердження причини відсутності, якщо це можливо. Під час лекцій проводиться інтерактивне опитування за її матеріалами, яке відіграє роль стимулюючого чинника для дискусії, підвищення зацікавленості та контролю відвідування лекції. У час поміж лекціями проводиться інтерактивне тестування за матеріалами попередньої лекції з метою стимулювання та спрямування самостійної роботи та визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою.

Під час сигналу повітряної тривоги заняття негайно припиняється, а всі учасники навчального процесу повинні пройти в найближче укриття. За наявності технічної можливості, заняття продовжується у разі констатації настання безпечних умов для усіх учасників. В іншому випадку, для завершення заняття організується додатковий час.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів. Заохочувальні бали можуть нараховуватись викладачем за активну участь у заняттях, виконання творчих робіт з освітньої компоненти або додаткового проходження он-лайн профільних курсів з отриманням відповідного сертифікату, та нараховуються під час складання заліку. Сума заохочувальних балів не може перевищувати 10% від рейтингової шкали. Штрафні бали в рамках програми не передбачені.

Політика дедлайнів та перескладань. Дедлайни здачі завдань та контрольних робіт є обов'язковими. У разі поважних причин, аспіранти можуть звернутись до викладача для можливої зміни продовження термінів. Запити на продовження дедлайну повинні бути подані заздалегідь.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

В рамках навчальної дисципліни передбачено кілька видів контролю та систему рейтингування результатів навчання, а саме:

Поточний контроль: інтерактивні опитування під час лекцій та інтерактивні тестові завдання для самостійного опрацювання.

Семестровий контроль: залік.

Рейтингова система оцінювання

Рейтинг слухача дисципліни розраховується на підставі результатів виконання ним наступних активностей:

- інтерактивні тестування під час лекцій (експрес-тестування);
- інтерактивні тестові завдання за матеріалами лекцій (тематичні тестування).

Максимальна оцінка за кожну активність становить 100 балів. Бали за активності нараховуються пропорційно до кількості правильних відповідей у тестуванні.

Внесок певного виду активностей у підсумкову оцінку враховується із застосуванням відповідних вагових коефіцієнтів:

- експрес-тестування: $w_l=0,2$;
- тематичні тестування: $w_t=0,8$.

Умовою допуску до заліку є виконання не менше 2/3 тематичних тестувань протягом семестру.

Підсумкова оцінка формується на підставі **семестрового рейтингу** слухача, який розраховується за формулою:

$$R_C = \frac{w_l}{N_l} \sum m_l + \frac{w_t}{N_t} \sum m_t + 0.1 \cdot m_+,$$

де w_l, w_t – вагові коефіцієнти для експрес-тестувань та тематичних тестувань, відповідно; N_l, N_t – кількість лекцій та тематичних тестів у семестрі, відповідно; m_l, m_t – кількість балів, отриманих слухачем за окрему активність для експрес-тестів та тематичних тестів, відповідно; m_+ -- заохочувальні бали, нараховані за 100-бальною шкалою.

У разі бажання слухача підвищити підсумкову оцінку, він може пройти усну співбесіду за лекційними матеріалами під час заліку. Результат співбесіди R_I оцінюється за 100-бальною шкалою, а підсумкова оцінка розраховується за формулою:

$$R = 0.6R_C + 0.4R_I.$$

Відповідність між кількістю балів, оцінкою за національною шкалою та шкалою ECTS наведена в таблиці:

Кількість балів	Шкала ECTS	Оцінка за національною шкалою
95-100	A	Відмінно
85-94	B	Добре
75-84	C	
65-74	D	
60-64	E	Задовільно
Менше 60	FX	Незадовільно
Не виконані умови допуску		Не допущено

9. Додаткова інформація з освітньої компоненти

Робочу програму освітньої компоненти (силабус):

Складено: завідувач відділу, кандидат хімічних наук, доцент О.О. Васильєв

Ухвалено Вченою радою Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича Національної академії наук України (протокол №10 від «06» серпня 2024 р.).