



ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН

1000 София
ул. „Сердика“ № 4
<http://edu.bas.bg>

email: tdc-phd@cu.bas.bg
тел.: 02 987 31 67
02 979 52 60

Основна информация:

Име на курса: Компютърно моделиране на молекулна структура и оптични свойства на единични молекули и надмолекулни агрегати

Лектор: проф. д-р Силвия Ангелова

Телефон: 0888726508

Имейл: sea@iomt.bas.bg

Хорариум: 30 учебни часа

Анотация:

Курсът е предназначен за докторанти със специалности в областта на химията или физиката. Целите на курса са: 1) запознаване на докторантите с основите на изчислителната химия и 2) въвеждане на докторантите в съвременните методи за компютърно моделиране с приложение за изследване на структура и свойства на фотоактивни системи. Предвидени са практически занятия, които имат за цел да илюстрират лекционния материал, а по редица теми – да разширят знанията и уменията на докторантите в използването на съвременни изчислителни методи за изследване на молекулните свойства и междумолекулните взаимодействия, които определят структурата и свойствата на материалите.

Тематично съдържание на курса (кратко описание по теми или модули):

Тема / Модул 1: Принципи и приближения в квантовата химия (2 часа); Изчислителни методи: *ab initio* методи, полуемпирични методи, молекулна механика, молекулна динамика, Monte Carlo метод и др. Йерархия на изчислителните методи (2 часа)

Тема / Модул 2: Теория на функционала на плътността (Density Functional Theory, DFT) (2 часа); Приложения на DFT за моделиране на различни нива на организация на веществото – атоми, молекули, твърди тела, наноструктури (7 часа); Методи за отчитане на влиянието на средата – експлицитни и имплицитни (2 часа)

Тема / Модул 3: Практически занятия: Работа с графичен софтуер *ChemDraw* и *GaussView*. Подготовка на входни файлове за програмата *Gaussian*. Съставяне на Z-матрици (8 часа); Работа с графичен софтуер *ChemCraft* и *GaussView*. Визуализиране на файлове с резултати от изчисления с *GaussView* и *PyMol* (7 часа)

Форми на обучение и оценяване:

Форма на обучение - преподаване, консултации;

Оценяване - писмен изпит (тест).

Компетентности, придобити в резултат на обучението (3-5 точки):

- Придобиване на знания за основните принципи и методи на изчислителната химия и тяхното приложение при изследване на молекулни системи.



ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН

1000 София
ул. „Сердика“ № 4
<http://edu.bas.bg>

email: tdc-phd@cu.bas.bg
тел.: 02 987 31 67
02 979 52 60

- Умения за използване на съвременни компютърни методи и специализиран софтуер за моделиране на молекулна структура, електронни и оптични свойства на единични молекули и надмолекулни агрегати.
- Способност за анализ и интерпретация на междумолекулни взаимодействия и връзката им със структурата и свойствата на материалите.
- Практически умения за провеждане на изследвания с методите на изчислителната химия, обработка и оценка на получените резултати.
- Компетентност за самостоятелно прилагане на компютърно моделиране в научноизследователска дейност в областта на химията, физиката и материалознанието.

Литература:

- 1) E. G. Lewars, Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics 2nd ed., 2011.
- 2) Николай Тютюлков, Строеж на молекулите, УИ "Св. Климент Охридски", 2007.
- 3) F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, J. Wiley&Sons, 1999.
- 4) Methods of Electronic-Structure Calculations: From Molecules to Solids, J. Wiley&Sons, 2000.
- 5) J. V. Foresman and Æ. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015.

Допълнителна информация (по желание) (например: специални изисквания, лабораторно оборудване, предварителни знания):

При възможност – собствен преносим компютър за участие в практическите занятия и работа със специализиран софтуер за компютърно моделиране. Предварителната подготовка за докторанти със специалности в областта на химията или физиката не е задължителна.