

TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN
KHOA KHOA HỌC VẬT LIỆU

CỘNG HÒA XÃ HỘI CHỦ NGHĨA VIỆT NAM
Độc lập - Tự do - Hạnh phúc

ĐỀ CƯƠNG CHI TIẾT MÔN HỌC

1. Thông tin về giảng viên:

- Họ và tên: Vũ Hoàng Nam
- Chức danh, học hàm, học vị: Thạc sĩ, Trợ giảng
- Thời gian, địa điểm làm việc:
- Địa chỉ liên hệ: Bộ môn Vật liệu Nano và Màng mỏng, Khoa Khoa học Vật liệu
- Điện thoại, email: vhnam@hcmus.edu.vn
- Thông tin về trợ giảng (nếu có) (họ và tên, địa chỉ liên hệ, điện thoại, e-mail):

2. Thông tin chung về môn học

- Tên môn học (tiếng Việt): VẬT LIỆU TÍNH TOÁN
- Tên môn học (tiếng Anh): CALCULATIONS IN MATERIALS SCIENCE
- Mã môn học: KVL340
- Số tín chỉ: 02
- Loại môn học (check vào các ô):
 - Bắt buộc: ☒
 - Tự chọn: ☐
 - Đại cương: ☐
 - Cơ sở ngành: ☐
 - Chuyên ngành: ☒
- Các môn học tiên quyết: Vật lý lượng tử, Cơ sở vật lý chất rắn.
- Các yêu cầu đối với môn học (nếu có):...
- Số tiết đối với các hoạt động:
 - Nghe giảng lý thuyết: 30 tiết
 - Làm bài tập trên lớp: 0 tiết
 - Thực hành, thực tập (ở PTN, nhà máy, thực tập thực tế...): 30 tiết
 - Thảo luận: 0 tiết
 - Tự học: 90 tiết
- Bộ môn phụ trách môn học: Bộ môn Vật liệu Nano và Màng mỏng

3. Mục tiêu của môn học

- Mục tiêu chung: Môn học sẽ giới thiệu các phương pháp tính toán cùng với các phần mềm mô phỏng trên máy tính dựa trên cơ học lượng tử trong cả vật lý và hóa học cho các loại vật liệu. Các phương pháp được thảo luận chủ yếu bao gồm lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT), các phiếm hàm xấp xỉ trao đổi-tương quan, các phương pháp giả thể kết hợp với các bộ cơ sở của hàm sóng, và động lực học phân tử. Qua đó môn học sẽ thể hiện các hiểu biết cơ bản để hiểu các tính chất và hiện tượng thú vị tìm thấy trong các vật liệu, đặc biệt ở các thang kích thước nguyên tử, phân tử, cluster, nano và khối.
- Mục tiêu cụ thể/ chuẩn đầu ra môn học:
 - Kiến thức: Khi hoàn thành môn học này, sinh viên có thể thực hiện các tính toán DFT cho các tính chất vật liệu đơn giản (ví dụ như trạng thái bền vững, cấu trúc điện tử, tính chất cơ của vật liệu v.v.). Sinh viên có thể phân tích các kết quả tính toán của họ và hiểu được các hạn chế của DFT.
 - Kỹ năng: Sinh viên có thể tích hợp được nhiều kỹ năng về máy tính và các phần mềm như Linux, Fortran, Quantum ESPRESSO, Gaussian v.v...
 - Thái độ, chuyên cần: Tích cực tham gia bài học, tiếp thu và phản hồi các kiến thức mới.

4. **Mô tả vắn tắt nội dung môn học:** Môn học sẽ giới thiệu các phương pháp tính toán cùng với các phần mềm mô phỏng trên máy tính dựa trên cơ học lượng tử trong cả lĩnh vực vật lý và hóa học cho các loại vật liệu.
5. **Nhiệm vụ của sinh viên**
- Dự lớp lý thuyết tối thiểu: 30 tiết
 - Thực hành: 25 tiết
 - Bài tập: 0 tiết
 - Thảo luận: 0 tiết
 - Yêu cầu khác: 0 tiết

6. **Tài liệu học tập**

STT	Tên tài liệu	Tác giả	Năm xuất bản	Giáo trình chính/Tài liệu tham khảo/Khác	Nơi có thể có tài liệu/trang web
1	Electronic Structure: basic theory and practical methods	Richard M. Martin	2004	Tài liệu tham khảo	Cambridge University Press
2	Density Functional Theory: A Practical Introduction	D. Sholl	2009	Tài liệu tham khảo	Wiley
3	Computational Materials Science: An Introduction	J. G. Lee	2011	Tài liệu tham khảo	CRC Press
4	Introduction to Computational Chemistry	F. Jensen	2009	Tài liệu tham khảo	Wiley
5	Atomic and Electronic Structure of Solids	E. Kaxiras	2003	Tài liệu tham khảo	Cambridge

7. **Phương pháp, hình thức đánh giá kết quả môn học**

- Kiểm tra – đánh giá quá trình: có trọng số 50%, bao gồm:
 - Điểm kiểm tra thường xuyên: 0 %.
 - Điểm thảo luận, bài tập, thực hành: 40 %.
 - Điểm chuyên cần: 10 %.
 - Điểm thi giữa kỳ: 0 %
 - Khác: 0 %
- Điểm thi kết thúc môn học: có trọng số 50%, bao gồm:
 - Điểm thi lý thuyết: 0 %.
 - Hình thức thi kết thúc môn học (*tự luận/ trắc nghiệm/ vấn đáp, khác*): tự luận.

*** Lưu ý: quy định điểm thi kết thúc môn học là bắt buộc và có trọng số không dưới 50% điểm tổng kết môn học.**

8. **Thang điểm:** theo thang điểm 10.

9. **Nội dung chi tiết môn học :** Ghi chi tiết đến 3 cấp(phần, chương, Mục)

Nội dung (Ghi chi tiết tên chương và từng bài dạy của)	Tuần thứ	Hình thức tổ chức dạy học	
		Số tiết lên lớp	SV tự nghiên cứu, tự học

<i>mỗi chương)</i>		Lý thuyết	Bài tập	Số tiết SV tự nghiên cứu, tự học	Thực hành, thí nghiệm, thực tập	Số tiết	Tài liệu
Chương 1: Giới thiệu 1.1 Mô hình, xấp xỉ và thực tế 1.2 Khả năng của tính toán mô phỏng cho vật liệu	1	3				12	1-5
Chương 2 Các nguyên lý cơ bản 2.1 Cơ học lượng tử 2.2 Sự tách biến 2.3 Bài toán nguyên tử kiểu hydrogen	2	6				18	1-5
Chương 3 Các phương pháp <i>ab initio</i> 3.1 Xấp xỉ Hartree-Fock 3.2 Định lý Hohenberg-Kohn 3.3 Các phương trình Kohn-Sham 3.4 Các phiếm hàm trao đổi-tương quan	3-4	6				27	1-5
Chương 4 Bộ cơ sở và giả thể nguyên tử 4.1 Các orbital Slater và Gaussian 4.2 Sóng phẳng và hệ tuần hoàn 4.3 Giả thể nguyên tử	5	6				27	1-5
Chương 5 Động lực học phân tử <i>ab initio</i> 5.1 Lực Hellmann-Feynman 5.2 Động lực học phân tử Born-Oppenheimer 5.3 Động lực học phân tử Car-Parrinello	6	3				18	1-5
Chương 6 Giới thiệu các phần mềm tính toán <i>ab initio</i> 6.1 Phần mềm Quantum ESPRESSO 6.2 Phần mềm Gaussian	7-8	6				27	1-5
Thực hành 1: • Tối ưu hóa cấu trúc nguyên tử và điện tử.	9-10	10			10	30	1-5

<ul style="list-style-type: none"> • Phân tích cấu trúc điện tử 							
Thực hành 2: <ul style="list-style-type: none"> • Tính toán tính chất đàn hồi của một số vật liệu khối • Tính toán năng lượng của các khuyết tật trong vật liệu khối 	11-12	10			10	30	1-5
Thực hành 3: <ul style="list-style-type: none"> • Tính toán hằng số lực, phổ dao động và các trạng thái chuyển tiếp • Thực hiện động lực học phân tử trên một số phân tử đơn giản cô lập 	13-14	10			10	30	1-5

TP.HCM, ngàytháng....năm

TRƯỞNG KHOA

HIỆU TRƯỞNG