



**П. А. Щепанський, М. Я. Рудиш**

# **МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МАТЕРІАЛІВ**

**Частина 1**

Методичні вказівки до лабораторних робіт  
для студентів фізичного факультету

Міністерство освіти і науки України  
Львівський національний університет імені Івана Франка

**МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ  
ВЛАСТИВОСТЕЙ МАТЕРІАЛІВ**  
Частина 1

Методичні вказівки  
до лабораторних робіт  
для студентів фізичного факультету

Львів – 2022

Рекомендовано до друку  
кафедрою загальної фізики  
протокол № 01 від 29.08.2022 р.

Уклали **Щепанський Павло Андрійович, Рудиш Мирон Ярославович**

**П. А. Щепанський, М. Я. Рудиш. Моделювання фізичних властивостей матеріалів : методичні вказівки до лабораторних робіт. – Львів, «ГАЛИЧ-ПРЕС», 2022. – 52 с.**

Методичні вказівки призначені для підготовки до виконання лабораторних робіт по моделюванню фізичних структур, структурній оптимізації, дослідженню енергетичних рівнів, електронних переходів, коливних спектрів, типів коливань, ангармонічних поправок, електричних властивостей. Короткі теоретичні відомості та завдання до лабораторних робіт допоможуть студентам підготуватися до занять.

Формат 60×84/16. Умовн. друк. арк. 3,02. Наклад 40 прим.

Друк ФОП Мацько Б.В.  
м. Львів, вул. Гнатюка, 17  
Ел. пошта: lvivprint@ukr.net. Тел. 096 59-88-924  
Код ДРФО 2898910093  
Витяг з реєстру платників єдиного податку  
№ 11879 від 08.07.2022

## ЗМІСТ

Вступ.....	4
Вимоги до оформлення звітів лабораторних робіт та порядок захисту.....	5
<i>Лабораторна робота №1. Моделювання молекулярних структур...</i>	6
<i>Лабораторна робота №2. Встановлення та ознайомлення з програмою GAMESS.....</i>	13
<i>Лабораторна робота №3. Запуск програми GAMESS та оптимізація структури молекул .....</i>	18
<i>Лабораторна робота №4. Розрахунок коливних спектрів в програмі GAMESS.....</i>	29
<i>Лабораторна робота №5. Базові фізичні властивості в GAMESS. Зв'язок з допоміжними програмами.....</i>	37
<i>Лабораторна робота №6. Розрахунок енергетичної структури в GAMESS.....</i>	41
<i>Лабораторна робота №7. Розрахунок енергетичних спектрів молекул .....</i>	47
Рекомендована література .....	51
Додаток.....	52