TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM KỸ THUẬT
THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH
KHOA CÔNG NGHỆ HÓA HỌC VÀ THỰC PHẨM

Ngành đào tạo: Hóa học
Trình độ đào tạo: Thạc sĩ

ĐỀ CƯƠNG CHI TIẾT MÔN HỌC

1. Tên môn học : Tính toán mô phỏng các cấu trúc và quá trình hóa học
Mã môn học : CSSP535307
2. Tên Tiếng Anh : Calculation and simulation of chemical structures and processes
3. Số tín chỉ : 3 tín chỉ (2/1/6) (2 tín chỉ lý thuyết, 1 tín chỉ thực hành, 6 tín chỉ tự học)
4. Loại hình : Tự chọn
5. Các giảng viên phụ trách môn học:
- TS. Nguyễn Phát Đạt

6. Điều kiện tham gia học tập môn học
Môn học tiên quyết: Hóa hữu cơ
Môn học trước: Không

7. Mô tả môn học (Course Description)
Nội dung môn học tập trung vào các thuật toán và công cụ phần mềm để tính toán chính xác các đặc tính của phân tử và mô phỏng các phản ứng hóa học, bao gồm các phần mềm hóa tính toán và trí tuệ nhân tạo. Học viên sẽ học cách áp dụng các mô hình lý thuyết để mô phỏng các hệ thống hóa học, dự đoán kết quả phản ứng và tối ưu hóa cấu trúc phân tử.

8. Mục tiêu môn học (Course Objectives)
Học viên được:
a. Cung cấp cho học viên các kiến thức về các phương pháp tính toán và mô phỏng hiện đại trong lĩnh vực hóa học, bao gồm hóa tính toán và trí tuệ nhân tạo.
b. Hướng dẫn học viên cách áp dụng các mô hình mô phỏng để phân tích và dự đoán cấu trúc phân tử và quá trình hóa học thông qua các ví dụ cụ thể.
c. Phát triển kỹ năng sử dụng các phần mềm chuyên dụng, ngôn ngữ lập trình và tiếng Anh chuyên ngành, giúp học viên tiếp cận và thích ứng với các công nghệ hiện đại trong lĩnh vực hóa tin.

9. Chuẩn đầu ra của môn học (Course Learning Outcomes)

CLOs	**Mô tả** *(Sau khi học xong môn học này, người học có thể:)*	**Chuẩn đầu ra CTĐT**	**Trình độ năng lực**
CLO1	Trình bày được nguyên tắc của các mô hình mô phỏng được sử dụng trong hóa học.	1.1	5
CLO2	Sử dụng thành thạo của phần mềm chuyên dụng để mô phỏng cấu trúc phân tử và phản ứng hóa học.	1.1	5
CLO3	Đánh giá, so sánh được hiệu quả của các mô hình khác nhau trong các vấn đề mô phỏng hóa học.	1.1	5
CLO4	Tự thiết kế được mô hình phù hợp cho một bài toán mô phỏng hóa học bất kỳ.	3.3	3

CLO5	Hiểu được các thuật ngữ và sử dụng tốt tiếng Anh trong các vấn đề mô phỏng hóa học.	2.3	4

10. Đạo đức khoa học:

Các bài tập, tiểu luận, báo cáo phải được thực hiện từ chính bản thân học viên. Nếu bị phát hiện có sao chép thì xử lý các học viên có liên quan bằng hình thức đánh giá **0** (không) điểm quá trình và cuối kỳ.

11. Nội dung chi tiết môn học:

Tuần	Nội dung	Tài liệu
1	**Chương 1:** Tổng quan về mô phỏng các cấu trúc và quá trình hóa học	
	Nội dung giảng dạy trên lớp: + Khái niệm, đặc điểm và tính chất của mô phỏng hóa học + Mục đích, ưu nhược điểm của mô phỏng hóa học + Quy trình thực hiện mô phỏng hóa học	[3]
	Các nội dung cần tự học ở nhà: + Tìm hiểu và cài đặt ngôn ngữ lập trình python và thư viện RDKit	
2	**Chương 2:** Cơ học và động học phân tử	
	Nội dung giảng dạy trên lớp: + Hình học phân tử + Cơ học phân tử + Động học phân tử	[1, 2]
	Các nội dung cần tự học ở nhà: + Thực hành mô phỏng cơ học và động học phân tử sử dụng RDKit và phần mềm Chimera	
3-5	**Chương 3:** Tính toán cơ học lượng tử	
	Nội dung giảng dạy trên lớp: + Khái quát lý thuyết cơ học lượng tử + Lý thuyết tính toán *ab initio* + Lý thuyết tính toán semiemperical + Lý thuyết tính toán density funtional theory (DFT) + Tính toán các tính chất của phân tử + Tính toán các quá trình hóa học	[1, 2]
	Các nội dung cần tự học ở nhà: + Thực hành tính toán các tính chất của phân tử và quá trình hóa học sửa dụng phần mềm Gaussian và Psi	
6-8	**Chương 4:** Ứng dụng học máy trong mô phỏng hóa học	
	Nội dung giảng dạy trên lớp: + Khái niệm về học máy + Phân loại học máy + Cách đánh giá các mô hình học máy + Lý thuyết các mô hình học máy + Sử dụng các mô hình học máy trong dự đoán tính chất phân tử và phản ứng hóa học	[3, 4]

	Các nội dung cần tự học ở nhà: + Tìm hiểu chi tiết cấu trúc, cách hoạt động và ứng dụng của các mô hình học máy + Thực hành xây dựng các mô hình học máy dự đoán tính chất phân tử và phản ứng hóa học sử dụng thư viện scikit-learn	
9-10	**Chương 5:** Ứng dụng học sâu trong trong mô phỏng hóa học	
	Nội dung giảng dạy trên lớp: + Khái niệm về học sâu và mô hình artificial neural network (ANN) + Thuật toán gradient descent + Perceptron + Mạng multi-layer perceptron (MLP) + Các mạng ANN nâng cao + Sử dụng các mô hình học sâu trong dự đoán tính chất phân tử và phản ứng hóa học	[3, 4]
	Các nội dung cần tự học ở nhà: + Tìm hiểu chi tiết cấu trúc, cách hoạt động và ứng dụng của các mô hình học sâu + Thực hành xây dựng các mô hình học sâu dự đoán tính chất phân tử và phản ứng hóa học sử dụng thư viện pytorch và pytorch-geometric	
11-15	**Học viên thực hành/báo cáo tiểu luận**	
	Nội dung giảng dạy trên lớp: - Học viên thực hành/báo cáo nội dung tiểu luận - GV góp ý bổ sung	[1-4]
	Các nội dung cần tự học ở nhà: - Tìm hiểu các đề tài báo cáo của các học viên khác	

12. Đánh giá kết quả học tập:

- Thang điểm: **10**
- Kế hoạch kiểm tra như sau:

TT	Nội dung	CLOs	TĐNL	PP đánh giá	Công cụ đánh giá	Tỉ lệ (%)
Đánh giá quá trình						**50**
Lần 1	Bài tập cá nhân	CLO2 CLO3 CLO4	3	Bài thực hành cá nhân	Phiếu chấm điểm	25
Lần 2	Bài tập cá nhân	CLO2 CLO3 CLO4	3	Bài thực hành cá nhân	Phiếu chấm điểm	25
Kiểm tra cuối kỳ cuối kỳ						**50**
Lần 3	Bài tập lớn cá nhân	CLO1 CLO2 CLO3 CLO4 CLO5	5	Tiểu luận cá nhân	Phiếu chấm điểm	50

CĐR môn học	Bài thực hành cá nhân	Tiểu luận cá nhân

CLO1		X
CLO2	X	X
CLO3	X	X
CLO4		X
CLO5	X	X

13. Tài liệu học tập

1. Jerzy Leszczynski, Anna Kaczmarek-Kedziera, Tomasz Puzyn, Manthos G. Papadopoulos, Heribert Reis, Manoj K. Shukla. *Handbook of Computational Chemistry 2nd Ed.* Springer (2017).
2. Trần Văn Tân, *Giáo Trình Hóa Học Lượng Tử Tính Toán*. NXB Giáo Dục (2016).
3. Hugh M Cartwright (2020). *Machine Learning in Chemistry: The Impact of Artificial Intelligence (Theoretical and Computational Chemistry, 17).* Royal Society of Chemistry.
4. Edward O. Pyzer-Knapp, Teodoro Laino. *Machine Learning in Chemistry: Data-Driven Algorithms, Learning Systems, and Predictions (ACS Symposium Series).* American Chemical Society (2020).

14. Ngày phê duyệt lần đầu: Ngày 09 tháng 07 năm 2023

15. Cấp phê duyệt:

Trưởng Khoa **Người biên soạn**

PGS. TS. Nguyễn Tấn Dũng **TS. Nguyễn Phát Đạt**