

Державний вищий навчальний заклад
«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»
Кафедра фізики і хімії твердого тіла

Проректор _____
" 15 " _____ 2016 р.

"ЗАТВЕРДЖУЮ"



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Квантово-хімічні методи

(шифр і назва навчальної дисципліни)

галузь знань 10 природничі науки

(шифр і назва галузі знань)

спеціальність 104 фізика та астрономія.

014 Середня освіта (014.08 Фізика)

(шифр і назва спеціальності)

спеціалізація _____

(назва спеціалізації)

факультет фізико-технічний

(назва факультету)

Робоча програма _____ Квантово-хімічні методи _____
(назва навчальної дисципліни)

для студентів за спеціальністю 104 фізика та астрономія, 014 Середня Освіта
(Фізика)

„___” _____, 20__ р. – __ с.

Розробники: (вказати авторів, їхні посади, наукові ступені та вчені звання)

_____ Лисак Алла Василівна, доцент кафедри фізики і хімії твердого тіла, кандидат фіз.-мат наук, доцент.

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри фізики і хімії твердого тіла

Протокол від “___” _____ 2016 р. № ___

Завідувач кафедри _____ фізики і хімії твердого тіла _____

_____ (Прокопів В.В.)
(підпис) (прізвище та ініціали)

“___” _____ 2016 р.

Схвалено методичною комісією факультету.

Протокол від “___” _____ 2016 р. № ___ 6 ___

“___” _____ 2016 р.

Голова _____ (Яцура М.М.)
(підпис) (прізвище та ініціали)

1. Ó Лисак А.В., 2016 рік
2. Ó ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника», 2016

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 3	Галузь знань: <u>10 природничі науки</u> ____ (шифр і назва)	Нормативна (за вибором)	
Модулів – 1	Спеціальність: <u>104 фізика та астрономія,</u> <u>014 Середня освіта (014.08 Фізика)</u>	Рік підготовки:	
Змістових модулів – 1		2-й	2-й
Індивідуальне науково-дослідне завдання _____ (назва)		Семестр	
Загальна кількість годин - 90		3-й,	3-й,
Тижневих годин для денної форми навчання: 6 аудиторних - 2 самостійної роботи студента - 4	Освітньо-кваліфікаційний рівень: _____ <u>магістр</u> _____	Лекції	
		14 год.	8 год.
		Практичні, семінарські	
		16 год.	6 год.
		Лабораторні	
		год.	год.
		Самостійна робота	
		60 год.	76 год.
Індивідуальні завдання: __ год.			
Вид контролю: залік,			

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи становить: $30/60=0,5$

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

1. Мета та завдання навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни «Квантово-хімічні методи» є вивчення студентами різних наближених методів знаходження одно електронного зонного спектру. Та розвиток навик наукової роботи з розрахунку енергетичного спектру електронів у кристалах з різним типом симетрії ґраток.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни «Квантово-хімічні методи» є розрахунок енергетичного спектру електронів у кристалах з різним типом симетрії ґраток; складання комп'ютерних програм розрахунку спектру та вміння користуватися науковою літераурою

1.3. Згідно з вимогами освітньо-професійної програми студенти повинні:

знати :

- загальну постановку задачі проблеми розвитку багатоелектронного рівняння Шредінґера;
- квантово-механічний розрахунок електронного спектру твердих тіл, зокрема напівпровідних матеріалів, в наближенні слабого зв'язку;
- зонний характер енергетичного спектру електронів в кристалах;
- поняття зони Бріллюена, її високосиметричних точок;
- метод лінійної комбінації атомних орбіталей та його застосування до різних сполук;
- одно електронне наближення, метод само узгодження поля Хартрі-Фока із врахуванням спин-орбітальної взаємодії.

вміти :

- використовувати отримані знання для розв'язання сучасних задач;
- робити розрахунок енергетичного спектру електронів у кристалах з різним типом симетрії ґраток;
- користуватися набутими знаннями при розгляді різноманітних практичних задач хімічної будови речовини для опису змін параметрів напівпровідникових матеріалів.
- Складати комп'ютерні програми розрахунку спектру електронів у кристалах

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 90 години / 3 кредити ЄКТС.

3. Програма навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1. . Класифікація та властивості напівпровідникових приладів

Тема 1. Проблема розвитку багатоелектронного рівняння Шредінґера. Наближений метод Бора-Опенгеймера.

Тема 2. Одноелектронне наближення Хартрі-Фока.

Тема 3. Квантово-механічний розрахунок енергетичного спектру електронів наближені слабого зв'язку (зони Бріллюена).

Тема 4. Метод сильного зв'язку для розрахунку енергетичного спектру напівпровідникових матеріалів

Тема 5. Метод лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО)

Тема 6. Наближення слабого зв'язку. Високо симетричні точки зони Бріллюена.

Тема 7. Розрахунок енергетичного спектру для окремих високо симетричних точок зони Бріллюена сполук $A^IV B^VI$ методом ЖАО.

Тема 8. Метод локалізованих функцій для розрахунку електронного енергетичного спектру ковалентних кристалів.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин												
	денна форма						заочна форма						
	усього	у тому числі					усього	у тому числі					
		л	п	лаб	інд	с.р.		л	п	лаб	інд	с.р.	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	
Модуль 1													
Змістовий модуль 1. Хімія напівпровідникових сполук та твердих розчинів													
Тема 1. Проблема розвитку багатоелектронного рівняння Шредінгера. Наближений метод Бора-Опенгеймера.	9	1	2				9	1					8
Тема 2. Односпектронне наближення Хартрі-Фока.	10	2	2				11	1					10
Тема 3. Квантово-механічний розрахунок енергетичного спектру електронів наближені слабкого зв'язку (зони Бриллюена).	12	2	2				11	1					10
Тема 4. Метод сильного зв'язку для розрахунку енергетичного спектру напівпровідникових матеріалів	9	1	2				9	1					8
Тема 5. Метод лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО)	9	1	2				9	1					8
Тема 6. Наближення слабкого зв'язку. Високо симетричні точки зони Бриллюена.	11	1	2				11	1	2				8
Тема 7. Розрахунок енергетичного спектру для окремих високо симетричних точок зони Бриллюена сполук $A^{II}B^{VI}$ методом ЖАО.	15	3	2				15	1	2				12
Тема 8. Метод локалізованих функцій для розрахунку електронного енергетичного спектру ковалентних кристалів.	15	3	2				15	1	2				12
Разом за змістовим модулем 1	90	14	16			60	90	8	6				76
Усього годин	90	14	16			60	90	10	8				76

5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Метод сильного зв'язку для розрахунку енергетичного спектру напівпровідникових матеріалів	4
2	Наближення слабого зв'язку. Високо симетричні точки зони Бріллюена.	4/2
3	Розрахунок енергетичного спектру для окремих високо симетричних точок зони Бріллюена сполук $A^{IV}B^{VI}$ методом ЖАО.	4/2
4	Метод локалізованих функцій для розрахунку електронного енергетичного спектру ковалентних кристалів	4/2

7. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Проблема розвитку багато електронного рівняння Шредінгера.	10/12
2	Наближений метод Бора-Опенгеймера.	10/12
3	Односпектроне наближення Хартрі-Фока.	10/12
4	Наближення слабого зв'язку.	10/12
5	Метод лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО)	10/14
6	Високо симетричні точки зони Бріллюена.	10/14
	Разом	60/76

8. Форма підсумкового контролю успішності навчання залік

9. Методи контролю

Лекційні заняття, практичні роботи, самостійна робота. Форма поточного контролю: усне опитування матеріалу лекційних занять та матеріалу винесеного на самостійне вивчення, доповідь або реферат.

10. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота	Підсумковий тест	Реферат	Сума
Змістовий модуль №1			
T1-T8	30	20	100
50			

T1, T2 ... T8 – теми змістових модулів.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, курсового проекту (роботи), практики	для заліку
90 – 100	A	відмінно	зараховано
80 – 89	B	добре	
70 – 79	C		
60 – 69	D	задовільно	
50 – 59	E		
26 – 49	FX	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
0-25	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням

			дисципліни
--	--	--	------------

11. Методичне забезпечення

Курси лекцій, завдання до практичних заняття.

12. Рекомендована література

1. Ашкрофт Н., Мермин Н. Теория твердого тела. -В 1-х т. М.: Мир, 1981.
2. Киттель Ч. Квантовая теория твердого тела. – М.:Мир,1967. -497 с.
3. Харрисон У. Теория твердого тела. -М.:Мир,1978. -616 с.
4. Ансельм А.М. Введение в теорию полупроводников. -М.:Мир,1965. -588 с.
5. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. М., Мир, 1981.-514 с.
6. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. Физика химической связи. Т 1,2. М., Мир, 1983.
7. Берсукер И.Б.Электронное строение и свойства координационных соединений. –Л.: Химия, 1976.-351 с.
8. Бацанов С.С., Звягина Р.А. Интегральные перекрытия и проблема эффективных зарядов. –Новосибирск:Наука,1966. Т.1.-386 с.
9. Товстюк К.Д. Полупроводниковое материаловедение.-К.: Наукова думка, 1984. -164 с.
10. Electronic properties of cubic crystals with an average of five valence electrons per atom/
Н.М. Palatoglou, G. Theodororou, and N.A. Economou / - J/Pfys.Rev., V.N.1, p.1161171/