

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДВНЗ «ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА»**

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Методи розрахунків з перших принципів у теорії твердого тіла

Освітньо-наукова програма 104 «Фізика та астрономія»

Освітній рівень третій (освітньо-науковий)

Спеціальність 104 «Фізика та астрономія»

Галузь знань 10 «Природничі науки»

Затверджено на засіданні
кафедри фізики і хімії твердого тіла
Протокол № 1 від “26” серпня 2021 р.

м. Івано-Франківськ - 2021

ЗМІСТ

1. Загальна інформація
2. Анотація до курсу
3. Мета та цілі курсу
4. Компетентності
5. Результати навчання
6. Організація навчання курсу
7. Система оцінювання курсу
8. Політика курсу
9. Рекомендована література

1. Загальна інформація	
Назва дисципліни	Методи розрахунків з перших принципів у теорії твердого тіла
Рівень вищої освіти	Доктор філософії
Викладач (-і)	Никируй Любомир Іванович – кандидат фізико-математичних наук, професор кафедри фізики і хімії твердого тіла
Контактний телефон викладача	+380956991785
Е-mail викладача	lyubomyr.nykyruy@pnu.edu.ua
Формат дисципліни	Очний
Обсяг дисципліни	3 кредити ECTS, 90 год.
Посилання на сайт дистанційного навчання	http://www.d-learn.pu.if.ua
Консультації	
2. Анотація до курсу	
<p>Дисципліна «Методи розрахунків з перших принципів у теорії твердого тіла» є дисципліною за вибором для спеціальності 104 Фізика та астрономія для третього (доктор філософії) освітньо-наукового рівня вищої освіти, яка викладається в 3 семестрі в обсязі 3 кредити (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). Зміст та матеріал навчальної дисципліни стосується аналізу сучасних проблем у розрахункових методах у галузі фізики, який орієнтує на актуальні питання та можливості моделювання структури та властивостей матеріалів, в рамках яких можлива подальша професійна та наукова кар'єра у галузі фізики та астрономії. На даному курсі аспіранти поглиблюють теоретичні знання теоретичних основ, а також практичні навички застосування методів звичайного і залежного від часу функціоналу електронної густини для розрахунків електронної структури і динамічних властивостей матеріалів, засвоюють основи роботи у прикладних програмних пакетах GAMESS US, Wien 2k, Burai та програмах обробки / аналізу розрахованих значень (Avogadro, Chemcraft, GaussSum, Molden, Xcrysden, тощо).</p> <p>Для вивчення курсу аспіранти повинні знати основні закони та поняття з курсів загальної фізики, квантової механіки, фізики твердого тіла; вміти застосовувати набуті раніше знання з курсів математичного аналізу, диференційних рівнянь, методів математичної фізики, загальної фізики, квантової механіки, статистичної фізики, фізики твердого тіла та комп'ютерних технологій для розв'язку практичних завдань; володіти навичками пошуку та опрацювання спеціалізованої літератури, розв'язку алгебраїчних і диференційних рівнянь, побудови та аналізу графічних залежностей.</p>	
3. Мета та цілі курсу	
<p>Мета курсу: Оволодіння основними фундаментальними уявленнями про сучасні методики розрахунків та принципи моделювання у галузі фізики та астрономіє, а також формування в аспірантів вмінь та навичок практичної роботи для розв'язання проблемних завдань.</p> <p>Завдання курсу:</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ обґрунтування необхідності переформулювання багаточасткової квантово-механічної задачі на мові одночастинкової теорії; ✓ введення поняття густини електронних станів як фундаментальної характеристики квантово-механічної системи; ✓ знайомство з математичним апаратом теорії функціонала електронної густини та доведення основних теорем; ✓ оволодіння базовими методами квантової хімії для опису структурних та термодинамічних характеристик матеріалів; ✓ отримання практичних навичок роботи із сучасними програмними пакетами, на 	

<p>базі яких реалізовано розрахунки властивостей матеріалів методом функціоналу електронної густини;</p> <p>✓ короткий екскурс в історію виникнення і розвитку теорії функціонала електронної густини.</p>					
4. Компетентності					
<p>ЗК01. Здатність до проведення самостійних досліджень для отримання нових знань і розуміння фізичного всесвіту на сучасному рівні.</p> <p>ЗК02. Здатність ефективно спілкуватися державною та іноземними мовами із спеціальною та загальною аудиторіями.</p> <p>ЗК04. Здатність до пошуку, обробки та аналізу інформації з різних джерел.</p> <p>ЗК07. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.</p> <p>СК04. Здатності здійснювати науково-педагогічну діяльність у вищій освіті.</p> <p>СК07. Здатності до самокритики, оцінювання та інтерпретації результатів експериментів та розрахунків.</p>					
5. Результати навчання					
<p>ПРН03. Пропонувати і перевіряти гіпотези; використовувати для обґрунтування висновків належні докази, зокрема, результати теоретичного аналізу, експериментальних досліджень і математичного, фізичного та комп'ютерного моделювання, наявні літературні дані.</p> <p>ПРН04. Створювати програмні продукти на різних мовах програмування відповідно до потреб дисертаційного дослідження, а також адаптувати, удосконалювати та вбудовувати програмні продукти, спочатку призначені для іншої мети.</p> <p>ПРН06. Робити огляд та пошук інформації в спеціалізованій літературі, використовуючи різноманітні ресурси: журнали, бази даних, он-лайн ресурси.</p>					
6. Організація навчання курсу					
Обсяг навчальної дисципліни 90 год.					
Вид заняття			Загальна кількість годин		
лекції			14 год		
семінарські заняття / практичні / лабораторні			16 год		
самостійна робота			60 год		
Ознаки курсу					
Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний / вибірковий		
3	104 Фізика та астрономія	2	вибірковий		
Тематика курсу					
Тема, план	Форма заняття	Література	Завдання, год	Вага оцінки	Термін виконання
Тема 1. Метод функціоналу густини. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока. Локальне наближення для обмінного потенціалу. Типи базисних функцій і матричних	Лекція, практичне заняття	[1, 2, 3, 4, 10, 11,]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом

елементів оператора Фока. Теорема Блоха. k-вектори та обернений простір. Зонні структури: 1D, 2D та 3D.					
Тема 2. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона. Теорія Томаса-Фермі. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини. Метод псевдопотенціалу. Формалізм плоских хвиль. Методи N-ого порядку. Обмінно-кореляційний потенціал (вихід за рамки методу самоузгодженого поля). Обмінно – кореляційні функції для DFT. Комірками Вігнера – Зейтца та лінеаризовані методи.	Лекція, практичне заняття	[1, 3, 8, 15]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 3. Напівемпіричні методи розрахунку Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля. Метод сильного зв'язку.	Лекція, практичне заняття	[2, 3, 8, 11]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 4. Емпіричні методи розрахунку. Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки. Парні потенціали. Багаточастинкові потенціали. Моделювання Кара-Парінілло. Зв'язок	Лекція, практичне заняття	[1, 8, 12, 13, 14]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом

розрахованих параметрів та експериментально вимірюваних характеристик.					
Тема 5. Огляд програмних пакетів для розрахунків DFT та методів молекулярної динаміки. Оптимізація структури	Лекція, практичні заняття	[26, 27, 28, 30]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 6. Підходи до аналізу результатів розрахунків енергетичної структури квантових систем. Комп'ютерна візуалізація нанооб'єктів. Аналіз заселеності за Маллікеном і альтернативні схеми розподілу заряду. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини.	Лекція, практичні заняття	[26, 29]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 7. Густина станів: інтерпретація результатів. Хімічні зв'язки. Фононний спектр. Сильно корельовані структури. Моделювання спектральних характеристик у фізиці та астрофізиці	Лекція, практичне заняття	[6, 7, 8, 9, 10]			До наступного заняття за розкладом
Підсумкове заняття	Підсумкова робота			30	
7. Система оцінювання курсу					
Загальна система оцінювання курсу	100 балів: 60 балів підсумовуються за виконані практичні завдання:				

	<ul style="list-style-type: none"> - Завдання: «Побудова розрахункового кластеру та оптимізація структури запропонованої системи» - 10 балів. - Завдання: «Застосування наближень локальної електронної густини (LDA) та узагальненого градієнтного наближення (GGA) для аналізу електронних станів» - 20 балів. - Завдання «Обмінно-кореляційні потенціали для різних типів напівпровідникових структур» - 20 балів. - Завдання «Моделювання поведінки структурних та термодинамічних характеристик реальних кристалічних структур» - 10 балів. <p>На 40 балів – оцінюється виконання тестів у системі дистанційного навчання.</p> <p>Деякі теми можуть поєднуватися (замінятися) із тестами у системі дистанційного навчання. Кількість балів за тести еквівалентна кількості балів за практичну роботу.</p> <p>Зараховано-“відмінно” – студент демонструє повні і глибокі знання навчального матеріалу, достовірний рівень розвитку умінь та навичок, правильне й обґрунтоване формулювання практичних висновків, наводить повний обґрунтований розв’язок прикладів та задач, аналізує причинно-наслідкові зв’язки; вільно володіє науковими термінами;</p> <p>Зараховано-“добре” – студент демонструє повні знання навчального матеріалу, але допускає незначні пропуски фактичного матеріалу, вміє застосувати його до розв’язання конкретних прикладів та задач, у деяких випадках нечітко формулює загалом правильні відповіді, допускає окремі несуттєві помилки та неточності розв’язках;</p> <p>Зараховано-“задовільно” – студент володіє більшою частиною фактичного матеріалу, але викладає його не досить послідовно і логічно, допускає істотні пропуски у відповіді, не завжди вміє правильно застосувати набуті знання до розв’язання конкретних прикладів та задач, нечітко, а інколи й невірно формулює основні твердження та причинно-наслідкові зв’язки;</p> <p>Незараховано – студент не володіє достатнім рівнем необхідних знань, умінь, навичок, науковими термінами/</p>
<p>Вимоги до практичної роботи</p>	<p>Практичне заняття проводиться з метою формування у аспірантів практичних умінь і навичок з предмету, формулювання та вирішення прикладних завдань, їх перевірка та оцінювання. За метою і структурою практичні заняття є ланцюжком, який пов’язує теоретичне навчання і навчальну практику з дисципліни, а також передбачає попередній контроль знань. Оцінка за кожне практичне заняття підсумовується і враховується при виставленні підсумкової оцінки з дисципліни.</p> <p>Практичні завдання виконуються із використанням прикладних програмних пакетів GAMESS US (відкритий код), Vurati (відкритий код), Wien 2k (наявна комерційна версія) та програмах обробки / аналізу розрахованих</p>

	значень (Avogadro, Chemcraft, GaussSum, Molden, Xcrysden тощо – із відкритим кодом для академічного застосування)
Умови допуску до підсумкового контролю	
8. Політика курсу	
<p>- самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання (для осіб з особливими освітніми потребами ця вимога застосовується з урахуванням їхніх індивідуальних потреб і можливостей);</p> <p>- посилання на джерела інформації у разі використання ідей, розробок, тверджень, відомостей;</p> <p>- надання достовірної інформації про результати власної навчальної (наукової, творчої) діяльності, використані методики досліджень і джерела інформації».</p> <p>Засвоєння пропущеної теми лекції з поважної причини перевіряється під час складання підсумкового контролю. Пропуск лекції з неповажної причини відпрацьовується студентом відповідно вимог (опрацювання робочого матеріалу, виконання тестових завдань у системі дистанційного оцінювання знань, тощо).</p> <p>Поточні негативні бали, отримані аспірантом під час засвоєння відповідної теми на практичному занятті перескладаються до складання підсумкового контролю з обов'язковою відміткою у журналі обліку роботи академічних груп.</p>	
9. Рекомендована література	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Вонсовский С. В., Кацнельсон М. И. Квантовая физика твердого тела, М.:Наука,1983 .- 336 с. 2. Стрижак Петро Євгенович, Квантова хімія: підручник, К.:ВД "Києво-Могилянська академія",2009 .-458 с. 3. Юхновський І. Р. Основи квантової механіки навч. Посібник, 2-ге вид., перероб. і доп. К.:Либідь,2002 .-392 с. 4. Кулаков А. В., Орленко Е. В., Румянцев А. А. Квантовые обменные силы в конденсированных средах, М.:Наука,1990 .-120 с. 5. Д.М.Заячук. Нанотехнології і наноструктури. Львів:"Львівська політехніка",2009 .-580 с. 6. Computational materials science: an introduction / June Gunn Lee // Second edition. Boca Raton : CRC Press, Taylor & Francis, 2017. – 351 p. 7. Киттель Ч., Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 8. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Квантовая механика: Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. 9. Є.С. Крячко, Є.Ю. Ремета, Теорія функціонала густини в атомній фізиці, УФЖ, Огляди. 2014. Т. 9, № 1. 10. Szabo, A.; Ostlund, N. S. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. McGraw-Hill: New York, 1989 11. Dronskowski, R. Computational Chemistry of Solid State Materials. Wiley-VCH Verlag: Weinheim, 2005. 12. Parr, R. G.; Yang, W. Annu. Rev. Phys. Chem. 1995, 46, 701. 13. Hartree, D. R. Proc. Cambr. Philos. Soc. 1929, 24, 111. 14. Stewart, J. J. P. In Semiempirical Molecular Orbital Methods, John Wiley & Sons: New York, 2007; pp 45–81. 15. Kohn, W.; Sham, L. J. Phys. Rev. 1965, 140, A1133. 16. Perdew, J. P.; Wang, Y. Phys. Rev. B 1986, 33, 8800. 17. Becke, A. D. Phys. Rev. A 1988, 38, 3098. 18. Perdew, J. P. Phys. Rev. B 1986, 33, 8822. 19. Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G. Phys. Rev. B 1988, 37, 785. 20. Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. Phys. Rev. Lett. 1996, 77, 3865. 	

21. Wigner, E.; Seitz, F. Phys. Rev. 1933, 43, 804
22. Deringer, V. L.; Tchougre'eff, A. L.; Dronskowski, R. J. Phys. Chem. A 2011, 115, 5461.
23. Lichtenstein, A. I.; Katsnelson, M. I. Phys. Rev. B 1998, 57, 6884.
24. Janssen, C. L.; Nielsen, I. M. B. Parallel Computing in Quantum Chemistry. CRC Press/Taylor & Francis Group: Boca Raton/London/New York, 2008.
25. Deringer, V. L., Dronskowski, R., & Wuttig, M. (2015). Microscopic Complexity in Phase-Change Materials and its Role for Applications. Advanced Functional Materials, 25(40), 6343-6359.
26. Deringer, V. L., & Dronskowski, R. (2013). Computational methods for Solids. Comprehensive Inorganic Chemistry II (Second Edition), Volume 9, 2013, Pages 59-87.
27. General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS) - User Guide.
28. Wien 2k – User Guide.
29. Xcrysden – User Guide.
30. Quantum Espresso – User Guide

Викладач



Никируй Л.І.