

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

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Розрахункові методи у дослідженні 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	Розрахункові методи у дослідженні 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 «Розрахункові методи у дослідженні 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 навиками 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 навиків 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 навиків роботи із сучасними програмними пакетами, на базі яких реалізовано розрахунки властивостей матеріалів методом функціоналу 	

<p>електронної густини;</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ володіти методами статистичної обробки масивів експериментальних даних, методами регресивного та кореляційного аналізів; ✓ володіти методами програмування для реалізації моделей фізичних систем, пакетами R, Matlab, Statistica. ✓ короткий екскурс в історію виникнення і розвитку теорії функціонала електронної густини.

4. Компетентності

ЗК01. Здатність до проведення самостійних досліджень для отримання нових знань і розуміння фізичного всесвіту на сучасному рівні.

ЗК02. Здатність ефективно спілкуватися державною та іноземними мовами із спеціальною та загальною аудиторіями

ЗК06. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК07. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

СК03. Здатність застосовувати сучасні інформаційні технології до аналізу великого обсягу даних, методи комп'ютерного моделювання, спеціалізоване програмне забезпечення та електронні ресурси у науковій та навчальній діяльності.

СК04. Здатності здійснювати науково-педагогічну діяльність у вищій освіті.

СК07. Здатності до самокритики, оцінювання та інтерпретації результатів експериментів та розрахунків.

5. Результати навчання

ПРН01. Мати та здобувати знання у фізиці, включаючи методики проведення експериментів і технологій. Знання повинні бути достатніми для проведення наукових досліджень рівня світових досягнень і направленими на їх розширення та поглиблення.

ПРН02. Ясно та ефективно описувати інтенсивні, глибокі й деталізовані результати наукової роботи державною та іноземною мовами. Вести спеціалізовані наукові семінари та публікувати наукові статті в провідних наукових журналах.

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.

ПРН13. Досягати відповідних знань, розуміння та здатностей використання методів аналізу даних і статистики на найсучаснішому рівні.

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. Статистичні методи у фізиці твердого тіла. Метод Монте-Карло. Статистичні ансамблі. Ймовірності елементарних подій. Алгоритми кінетичного Монте-Карло моделювання. Критерій Стюдента, Фішера, Чебишева.	Лекція, практичне заняття	[1, 2, 3, 4, 5]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 2. Кореляційний аналіз. Парні, множинні та автокореляційні функції. Моделювання з використанням пакетів R, Matlab, Stastica. Застосування статистичного моделювання до задач астрономії Використання обробки даних у середовищах Excel, Origin	Лекція, практичне заняття	[2-5, 9]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 3. Метод DFT. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока. Локальне наближення для обмінного потенціалу.	Лекція, практичне заняття	[1, 9, 13-18]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 4. Принцип Кона-Шема. Наближення локальної густини. Метод псевдопотенціалу. Обмінно-кореляційний потенціал.	Лекція, практичне заняття	[1, 6, 7, 8, 13]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 5. Емпіричні та напівемпіричні методи розрахунку. Метод молекулярних орбіталей.	Лекція, практичне заняття	[10, 11, 19]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до	10	До наступного заняття за розкладом

			практичного заняття		
Тема 6. Розрахункові програмні пакети. Огляд програмних пакетів для розрахунків DFT та методів молекулярної динаміки. Оптимізація структури	Лекція, практичні заняття	[19-23]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 7. Комп'ютерна візуалізація нанооб'єктів. Топологія густини електронних станів.	Лекція, практичні заняття	[22]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 8. Прикладні програми для моделювання фізичних процесів. Основи роботи у R, Matlab, Excel, Origin. Розрахунки з перших принципів у середовищах GAMESS US, Wien 2k, Burai, Quantum Espresso	Лекція, практичне заняття	[19-23]			До наступного заняття за розкладом
Підсумкове заняття	Підсумкова робота			30	

7. Система оцінювання курсу

Загальна система оцінювання курсу	<p>100 балів:</p> <p>60 балів підсумовуються за виконанні практичні завдання:</p> <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>
Вимоги до практичної роботи	<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), Bugarі (відкритий код), Wien 2k (наявна комерційна версія) та програмах обробки / аналізу розрахованих значень (Avogadro, Chemcraft, GaussSum, Molden, Xcrysden тощо – із відкритим кодом для академічного застосування). Статистична обробка результатів виконується у пакетах R, Mathlab, Stasistica, Excel (безкоштовні версії відповідних програм для навчальних цілей)..</p>
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>	

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.

9. Рекомендована література

1. Вонсовский С. В., Кацнельсон М. И. Квантовая физика твердого тела, М.:Наука,1983 .- 336 с.
2. Немошкаленко В. В., Кучеренко Ю. Н. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронные состояния в неидеальных кристаллах, К.:Наукова думка,1986 .-296.
3. Барьяхтар В. Г., Зароченцев Е. В., Троицкая Е. П. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Атомные свойства металлов, К.:Наукова думка,1990 .-376 с.
4. Брусенцев Ф. А. Математические методы решения некоторых задач физики твердого тела и структурной химии с использованием ЭЦВМ, К.:Наукова думка,1973 .-240 с.
5. В. В. Немошкаленко Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура идеальных и дефектных кристаллов, К.:Наукова думка,1991 .- 456 с.
6. Стрижак Петро Євгенович, Квантова хімія: підручник, К.:ВД "Києво-Могилянська академія",2009 .-458 с.
7. Юхновський І. Р. Основи квантової механіки навч. Посібник, 2-ге вид., перероб. і доп. К.:Либідь,2002 .-392 с.
8. Кулаков А. В., Орленко Е. В., Румянцев А. А. Квантовые обменные силы в конденсированных средах, М.:Наука,1990 .-120 с.
9. Computational materials science: an introduction / June Gunn Lee // Second edition. | Boca Raton : CRC Press, Taylor & Francis, 2017. – 351 p.
10. Киттель Ч., Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
11. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Квантовая механика: Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974.
12. Є.С. Крячко, Є.Ю. Ремета, Теорія функціонала густини в атомній фізиці, УФЖ, Огляди. 2014. Т. 9, № 1.
13. Szabo, A.; Ostlund, N. S. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. McGraw-Hill: New York, 1989
14. Dronskowski, R. Computational Chemistry of Solid State Materials. Wiley-VCH Verlag: Weinheim, 2005.
15. Deringer, V. L.; Tchougre'eff, A. L.; Dronskowski, R. J. Phys. Chem. A 2011, 115, 5461.
16. Lichtenstein, A. I.; Katsnelson, M. I. Phys. Rev. B 1998, 57, 6884.
17. Janssen, C. L.; Nielsen, I. M. B. Parallel Computing in Quantum Chemistry. CRC Press/Taylor & Francis Group: Boca Raton/London/New York, 2008.
18. 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.
19. Deringer, V. L., & Dronskowski, R. (2013). Computational methods for Solids. Comprehensive Inorganic Chemistry II (Second Edition), Volume 9, 2013, Pages 59-87.
20. General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS) - User Guide.
21. Wien 2k – User Guide.
22. Xcrysden – User Guide.
23. Quantum Espresso – User Guide.

Викладач



Никирой Л.І.