

Державний вищий навчальний заклад
«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»



«ЗАТВЕРДЖУЮ»
проректор з навчальної роботи
С.В. Шарин
« »



РОБОЧА ПРОГРАМА 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»

Робоча програма «**Розрахункові методи у дослідженні твердого тіла**» для аспірантів всіх спеціальностей. 12 с.

Розробник:

Никируй Л.І. – професор кафедри фізики і хімії твердого тіла

Робочу програму схвалено на засіданні фізики і хімії твердого тіла

Протокол від 26 серпня 2021 року № 1

Завідувач кафедри
фізики і хімії твердого тіла _____ Прокопів В.В.
(підпис)

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 6	Галузь знань 10 «Природничі науки» Спеціальність 104 «Фізика та астрономія»	Вибіркова	
Змістових модулів – 2			
Кількість кредитів – 3	Освітня програма 104 «Фізика та астрономія»	Рік підготовки:	
Індивідуальне науково-дослідне завдання: –		2-й	
Загальна кількість годин - 90		Семестр	
		2-й	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 4	Освітній рівень: третій (освітньо-науковий) PhD	Лекції	
		14 год.	
		Практичні, семінарські	
		16 год.	__ год
		Лабораторні	
		__ год.	__ год.
		Самостійна робота	
		60 год.	
Індивідуальні завдання: __			
год.			
Вид контролю: Залік			

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

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 застосуванням 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).

Мета курсу: Оволодіння основними фундаментальними уявленнями про сучасні методи квантово-механічних розрахунків та принципи моделювання у

галузі фізики та астрономії, а також формування в аспірантів вмінь та навиків практичної роботи для формулювання та розв'язання проблемних завдань.

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.

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.

3. Програма навчальної дисципліни

Тема 1. Статистичні методи у фізиці твердого тіла.

1. Метод Монте-Карло.
2. Статистичні ансамблі.
3. Ймовірності елементарних подій.
4. Алгоритми кінетичного Монте-Карло моделювання.
5. Критерій Стюдента, Фішера, Чебишева.

Тема 2. Кореляційний аналіз.

1. Парні, множинні та автокореляційні функції.
2. Статистичне моделювання. Застосування статистичного моделювання до задач астрономії.
3. Використання обробки даних у середовищах Excel, Origin.

Тема 3. Метод DFT.

1. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока.
2. Локальне наближення для обмінного потенціалу.

Тема 4. Принцип Кона-Шема.

1. Наближення локальної густини.
2. Метод псевдопотенціалу.
3. Обмінно-кореляційний потенціал.

Тема 5. Емпіричні та напівемпіричні методи розрахунку

1. Емпіричні та напівемпіричні методи розрахунку.
2. Метод молекулярних орбіталей.

Тема 6. Розрахункові програмні пакети.

1. Огляд програмних пакетів для розрахунків DFT та методів молекулярної динаміки.
2. Оптимізація структури.

Тема 7. Комп'ютерна візуалізація нанооб'єктів.

1. Комп'ютерна візуалізація нанооб'єктів.
2. Топологія густини електронних станів

Тема 8. Прикладні програми для моделювання фізичних процесів.

1. Основи роботи у R, Matlab, Excel, Origin.
2. Розрахунки з перших принципів у середовищах GAMESS US, Wien 2k, Burai, Quantum Espresso.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин										
	денна форма						заочна форма				
	усього	у тому числі					усьог о	у тому числі			
л		п	лаб	інд	с.р.	л		п	лаб	інд	с.р.
1	2	3	4	5	6	7					
Тема 1. Статистичні методи у фізиці твердого тіла	9	2	2			5					
Тема 2. Кореляційний аналіз	9	2	2			5					
Тема 3. Метод DFT	9	2	2			5					
Тема 4. Принцип Кона-Шема	9	2	2			5					
Тема 5. Емпіричні та напівемпіричні методи розрахунку	9	2	2			5					
Тема 6. Розрахункові	9	2	2			5					

програмні пакети												
Тема 7. Комп'ютерна візуалізація нанооб'єктів	14	2	2			15						
Тема 8. Прикладні програми для моделювання фізичних процесів	12		2			15						
Усього годин	90	14	16			60						

5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Статистичні методи аналізу результатів.	2
2	Програми обробки та візуалізації результатів.	2
3	Статистичні методи в астрофізичних дослідженнях.	4
4	<i>Ab initio</i> розрахунки: прикладні аспекти	4
5	Обмінно-кореляційні потенціали для різних типів напівпровідникових структур	4
Разом		16

6. Теми лабораторних занять

Відповідно до робочої програми з дисципліни «Розрахункові методи у дослідженні твердого тіла» лабораторні заняття не заплановані

7. Самостійна робота

Самостійна робота аспірантів – невід’ємна складова частина навчально-наукового процесу, яка відіграє важливу роль у процесі формування майбутнього спеціаліста.

Мета самостійної роботи – набуття навичок щодо вирішення конкретних практичних завдань і використання отриманих знань у подальшій практичній діяльності.

Самостійна робота при вивченні курсу складається з різних її видів:

- підготовка до аудиторних занять (лекцій, практичних занять);
- завершення розпочатих на практичних заняттях завдань, передбачених робочою програмою курсу;
- самостійне опрацювання окремих тем навчальної дисципліни згідно з навчально-тематичним планом.

Підготовка до лекційного заняття передбачає обов’язкове вивчення матеріалу попередньої лекції і ознайомлення з матеріалами наступної лекції (підручники, посібники).

Підготовка до практичних занять передбачає обов’язкове вивчення отриманого теоретичного матеріалу з метою подальшого застосування знань на практичних заняттях, у наступній практичній діяльності. При підготовці до заняття відповідної теми необхідно детально вивчити конспект лекції, підручник (навчальний посібник) та коротко законспектувати засвоєний матеріал. Практичні заняття передбачають вивчення теоретичного матеріалу та виконання завдань. Аспірант самостійно завершує у позааудиторних умовах розпочаті в аудиторіях завдання і здає у час, який встановлює викладач.

Виконувати завдання необхідно в такій послідовності:

- ознайомитись із завданням і вивчити його умову;
- визначити методи (прийоми) розв’язання кожної конкретної ситуації;
- безпосередньо почати розв’язувати завдання;
- обґрунтувати висновки і пропозиції згідно з отриманими результатами;
- виконане завдання належно оформити;
- захистити завдання (якщо це встановлено робочою програмою дисципліни) відповідно до встановленого графіка самостійної роботи.

Якщо передбачений програмою обсяг завдань аспірант не виконав і не захистив, то до іспиту його не допускають.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Метод Монте-Карло.	5
2	Критерій Стюдента, Фішера, Чебишева	5
3	Кореляційний аналіз.	10
4	Моделювання з використанням пакетів R, Mathlab, Stastica. Використання обробки даних у середовищах Excel, Origin	5
5	Метод DFT.	5
6	Метод псевдопотенціалу. Метод молекулярних орбіталей	10
7	Моделювання астрофізичних процесів.	10
8	Розрахункові програмні пакети GAMESS US, Wien 2k, Burai, Quantum Espresso	10
Разом		60

8. Індивідуальні завдання

Відповідно до робочої програми з дисципліни «Розрахункові методи у дослідженні твердого тіла» індивідуальні завдання не заплановані.

9. Методи навчання

Словесні (навчальна лекція, пояснення, розповідь, бесіда, навчальна дискусія, диспут). Наочні (спостереження, демонстрування). Практичні (експериментальні навички). Проблемно-пошукові (розв'язання проблемних ситуацій і завдань, проблемне викладення). Методи за логікою руху змісту навчального матеріалу (індуктивні, дедуктивні).

За характером пізнавальної діяльності, при вивченні дисципліни «Методи розрахунків з перших принципів у теорії твердого тіла» використовуються: пояснювально-наочний проблемний виклад; частково-пошуковий та дослідницький методи.

10. Методи контролю

Методами контролю з дисципліни «Розрахункові методи у дослідженні твердого тіла» є поточний та підсумковий контроль.

Поточний контроль здійснюється під час проведення практичних занять і має на меті перевірку рівня підготовленості студента до виконання конкретної роботи. Формами проведення поточного контролю з дисципліни є:

- усні опитування на практичних заняттях;
- захисти підготовлених завдань (на лекційних та практичних заняттях);
- тестування тощо.

Підсумковий контроль проводиться з метою оцінки результатів навчання на освітньому рівні бакалавра. Підсумковий контроль з дисципліни «Методи розрахунків з перших принципів у теорії твердого тіла» включає семестровий контроль у формі заліку.

Критерії оцінювання рівня знань на практичних заняттях, при виконанні самостійних та індивідуальних завдань:

5 балів – коли аспірант дає обґрунтовані, теоретично і практично правильні відповіді на запитання, рішення завдань правильні, демонструє знання навчально-методичної літератури, наводить узагальнення і висновки, був присутній на лекціях і практичних заняттях;

4 бали – коли аспірант знає викладений матеріал на «відмінно», але ним допущені незначні помилки у формулюванні термінів, категорій, розрахунків, коли за допомогою викладача швидко орієнтується і знаходить правильні відповіді. Присутність на лекціях і практичних заняттях обов'язкова;

3 бали – коли аспірант дає неправильну відповідь на одне запитання або на всі запитання дає малообґрунтовані, невичерпні відповіді, припускається грубих помилок у розрахунках і тільки за допомогою викладача може виправити допущені помилки;

2 бали – коли аспірант дає неправильні відповіді на 2-3 запитання, припускається грубих помилок у розрахунках і не може їх виправити, погано орієнтується в лекційному матеріалі;

1 бал – аспірант отримує за умови, якщо не зміг викласти зміст питання, погано орієнтується в матеріалі; відсутні логічна послідовність висловлювань та зміст відповіді; виконане завдання містить багато помилок, що заважають розумінню загального змісту;

0 балів – відповідь відсутня.

11. Оцінювання

Під час навчання студенти можуть отримати такі бали: Назва контролю	Мак кількість балів	Примітки
Практичні заняття	60	4 практичні тематичні роботи (робота в групах в аудиторії)
Залік	40	Мін оцінка допуску – 25 Мак оцінка допуску – 60
Разом:	100	Відмінно!

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

12. Перелік питань, які виносяться на залік

1. Статистичні та детерміновані моделі
2. Метод Монте-Карло при моделюванні фізичних процесів.
3. Методи комп'ютерного планування.
4. Прогресивний та кореляційний аналіз в теорії моделювання.
5. Статистичні методи перевірки адекватності фізичної моделі.
6. Адаптивні та прогнозуючі моделі.
7. Рівняння регресії. Метод найменших квадратів.
8. Розподіли Пуассона та Гауса.
9. Для якого виду потенціалу в рівнянні Шредінгера немає точного опису?
10. В теорії псевдопотенціалу основні рівні розглядаються як ...
11. Яка перевага ультрам'яких псевдопотенціалів над нормозберігаючими?
12. Що означає розрахунок «з перших принципів»?
13. Якими методами можна скористатися для часо-залежних розрахунків?
14. Фізичний зміст енергії обрізання?
15. В чому полягає суть збіжності самоузгоджених розрахунків?
16. Що показує густина станів?
17. Що описує термін «електронна структура»?
18. Відповідно до теореми Блоха густина має періодичність?
19. Для спрощення багаточастинкових розрахунків, яке використовують наближення?
20. Теорема Хохенберга і Конна стверджує...
21. Яким рівнянням описується енергія основного стану в теорії функціонала густини?
22. Всі потенціали, що входять в рівняння Шредінгера відповідно до теорією функціонала густини є функцією...
23. Для яких систем використовують наближення суперкомірки?
24. Для чого у моделі суперкомірки використовують вакуумну щільність?
25. Набір k-точок у DFT визначається по схемі...
26. Відповідно до теореми Блоха який параметр є квазі-періодичним?
27. Точка, яка знаходиться в центрі першої зони Бріллюена має назву?
28. Зонно-енергетична структура твердого тіла.
29. На зонно-енергетичній діаграмі напівпровідників і діелектриків проміжок над рівнем Фермі, в якому немає зон має назву?
30. Які властивості кристалу можна розрахувати на основі зонно-енергетичної діаграми?
31. Пошук рівноважних параметрів ґратки при яких енергія є мінімальною ґрунтується на рівнянні...
32. Методи розрахунку одноелектронних станів кристалу. Метод МО-ЛКАО.
33. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока. Локальне наближення для обмінного потенціалу. Типи базисних функцій і матричних елементів оператора Фока.
34. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона. Теорія Томаса-Фермі.
35. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини.
36. Метод псевдопотенціалу. Формалізм плоских хвиль.
37. Метод конфігураційної взаємодії. Обмінно-кореляційні функціонали. Параметричні функціонали.
38. Аналітичні та чисельні методи оптимізації геометрії (метод найшвидшого спуску, метод спряжених градієнтів.)
39. Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля.
40. Моделі зоряних атмосфер зір з різними масами та металічностями.
41. Моделювання зоряного вітру.
42. Моделювання формування оболонки планетарної туманності.
43. Моделювання вибухів наднових.
44. Моделювання еволюції залишків наднових.

45. Моделювання формування планетних систем навколо зір.
46. Еволюційно-популяційний синтез областей зореутворення.
47. Хемодинамічні симуляції еволюції галактик з активним зореутворенням.
48. Фотоіонізаційний аналіз результатів хемодинамічних симуляцій.
49. Моделювання утворення перших молекул.

12. 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-Могиллянська 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.