

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



**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**  
проректор з навчальної роботи  
С.В. Шарин  
«    »    2021 р.



## РОБОЧА ПРОГРАМА 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»

Робоча програма «**Методи розрахунків з перших принципів у теорії 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 22 червня 2021 року № 11**

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 <b>10 «Природничі науки»</b> Спеціальність <b>104 «Фізика та астрономія»</b>	Вибіркова	
Змістових модулів – 2			
Кількість кредитів – 3	Освітня програма <b>104 «Фізика та астрономія»</b>	<b>Рік підготовки:</b>	
Індивідуальне науково-дослідне завдання: –		2-й	
Загальна кількість годин - 90		<b>Семестр</b>	
		2-й	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 4	Освітній рівень: третій (освітньо-науковий) PhD	<b>Лекції</b>	
		14 год.	
		<b>Практичні, семінарські</b>	
		16 год.	_ год
		<b>Лабораторні</b>	
		_ год.	_ год.
		<b>Самостійна робота</b>	
		60 год.	
<b>Індивідуальні завдання: __</b> год.			
Вид контролю: Залік			

## 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Зміст курсу передбачає 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).

**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.

### **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.

ЗК04. Здатність до пошуку, обробки та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК07. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

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

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

### **Результати навчання:**

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.

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.

ПРН06. Робити огляд та пошук інформації в спеціалізованій літературі, використовуючи різноманітні ресурси: журнали, бази даних, он-лайн ресурси.

## **3. Програма навчальної дисципліни**

### **Тема 1. Метод функціоналу густини.**

1. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока.
2. Локальне наближення для обмінного потенціалу.
3. Типи базисних функцій і матричних елементів оператора Фока.
4. Теорема Блоха.
5.  $k$ -вектори та обернений простір.
6. Зонні структури: 1D, 2D та 3D.

### **Тема 2. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона.**

1. Теорія Томаса-Фермі. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини.
2. Метод псевдопотенціалу.
3. Формалізм плоских хвиль.
4. Методи  $N$ -ого порядку.
5. Обмінно-кореляційний потенціал (вихід за рамки методу самоузгодженого поля). Обмінно – кореляційні функції для DFT.
6. Комірками Вігнера – Зейтца та лінеаризовані методи.

### **Тема 3. Напівемпіричні методи розрахунку.**

1. Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля.

2. Метод сильного зв'язку.

#### Тема 4. Емпіричні методи розрахунку.

1. Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки.
2. Парні потенціали. Багаточастинкові потенціали.
3. Моделювання Кара-Парінелло.
4. Зв'язок розрахованих параметрів та експериментально вимірюваних характеристики.

#### Тема 5. Огляд програмних пакетів

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

#### Тема 6. Підходи до аналізу результатів розрахунків енергетичної структури квантових систем.

1. Комп'ютерна візуалізація наноб'єктів.
2. Аналіз заселеності за Маллікеном і альтернативні схеми розподілу заряду.
3. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини.

#### Тема 7. Густина станів.

1. Густина станів: інтерпретація результатів.
2. Хімічні зв'язки.
3. Фононний спектр.
4. Сильно корельовані структури.

### 4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин											
	усього	денна форма					усьог о	заочна форма				
		у тому числі						у тому числі				
		л	п	лаб	інд	с.р.		л	п	лаб	інд	с.р.
1	2	3	4	5	6	7						
Тема 1. Метод функціоналу густини	9	2	2			5						
Тема 2. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона	9	2	2			5						
Тема 3. Напівемпіричні методи розрахунку	14	2	2			10						
Тема 4. Емпіричні методи розрахунку	9	2	2			5						

Тема 5. Огляд програмних пакетів	<b>9</b>	2	2			5						
Тема 6. Підходи до аналізу результатів розрахунків енергетичної структури квантових систем	<b>16</b>	2	4			10						
Тема 7. Густина станів	<b>14</b>	2	2			10						
<b>Усього годин</b>	<b>90</b>	<b>14</b>	<b>16</b>			<b>60</b>						

## 5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Огляд програмних пакетів	2
2	Програми обробки та візуалізації результатів. Інтерпретація результатів. Похибки	2
3	Побудова розрахункового кластеру та оптимізація структури запропонованої системи	4
4	Застосування наближень локальної електронної густини (LDA) та узагальненого градієнтного наближення (GGA) для аналізу електронних станів	4
5	Обмінно-кореляційні потенціали для різних типів напівпровідникових структур	4
<b>Разом</b>		<b>16</b>

## 6. Теми лабораторних занять

Відповідно до робочої програми з дисципліни «Управління науково-дослідницькими проектами» 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	Одноелектронне наближення. Метод Хартрі-Фока.	5
2	Пост-Хартрі-Фоківські наближення. Метод функціоналу густини	5
3	Теорема Гогенберга-Кона. Теорема Кона-Шема.	10
4	Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки. Парні потенціали. Багаточастинкові потенціали.	5
5	Підходи до аналізу результатів розрахунків енергетичної структури квантових систем. Електронна структура твердих тіл біля поверхні.	5
6	Практичні аспекти DFT. Стратегії наближення невідомого обмінно-кореляційного потенціалу.	10
7	Концепція ширини забороненої зони. Практична схема розв'язання рівняння Кона-Шема за допомогою самоузгодженого наближення.	10
8	Молекулярне конструювання. Комп'ютерна візуалізація нанооб'єктів. Аналіз заселеності за Маллікеном і альтернативні схеми розподілу заряду. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина	10
<b>Разом</b>		<b>60</b>

## 8. Індивідуальні завдання

Відповідно до робочої програми з дисципліни «Методи розрахунків з перших принципів у теорії 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 «Методи розрахунків з перших принципів у теорії 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
<b>Разом:</b>	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	<b>A</b>	відмінно	зараховано
80 – 89	<b>B</b>	добре	
70 – 79	<b>C</b>		
60 – 69	<b>D</b>	задовільно	
50 – 59	<b>E</b>		

26 – 49	<b>FX</b>	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
0-25	<b>F</b>	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

## 12. Перелік питань, які виносяться на залік

1. В чому суть квантова-механічного підходу розрахунків «із перших принципів» для моделювання структур?
2. Які комп'ютерні пакети використовуються для проведення моделювання структури та фізичних властивостей? Переваги та недоліки.
3. В чому головна суть теорії функціонала густини?
4. З якою метою використовують метод молекулярної динаміки?
5. З якою метою проводиться оптимізація структури?
6. В чому складність розрахунків з перших принципів?
7. Види псевдопотенціалів.
8. Види обмінно-кореляційних потенціалів.
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. Сучасні методи врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу 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. Кластерні методи.  $X\alpha$  - метод. Кластерне наближення та його застосування.
41. Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки.
42. Моделювання Кара-Парінелло.
43. Моделювання точкових дефектів. Електронна структура твердих тіл біля поверхні. Стани Тамма і Шоклі.
44. Розрахунок електростатичної енергії іонного кристалу методом Евальда.
45. Аналіз хімічного зв'язку. Аналіз заселеності по Маллікену і альтернативні схеми розподілу заряду.
46. Аналіз хімічного зв'язку на основі розподілу електронної густини. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини.
47. Спектр уявної частини діелектричної проникності за результатами зонного розрахунку.
48. Аналіз Крамерса-Кроніга. Розрахунок оптичних спектрів.
49. Атомні та пружні характеристики твердих тіл.
50. Ab initio розрахунки фононних спектрів кристалів і надграток.
51. Обчислення енергетичних характеристик і термодинамічних функцій, передбачення стійкості системи.
52. Розрахунок деяких характеристик ІЧ, ЕПР, ЯМР, ЯГР –спектрів.
53. Вплив зовнішніх полів (температура, тиск, магнітне поле) на зонно-енергетичну структуру твердих тіл.
54. Розподіли густини станів вуглецевих нанотрубок
55. Розрахунок параметрів екранування далекодіючого кулонівського вкладу в потенціал парної міжіонної взаємодії.

## 12. Рекомендована література

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.