

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Фізичний факультет
Кафедра фізики металів

Затверджено

На засіданні кафедри фізики металів
фізичного факультету
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 9 від 29.08.2022 р.)

Завідувач кафедри



проф. Мудрий С. І.

Силабус з навчальної дисципліни
«Модельні методи в фізиці металів»,
що викладається в межах ОНП *Експериментальна фізика*
другого (магістерського) рівня вищої освіти
для здобувачів з спеціальності *104 Фізика та астрономія*

Львів 2022

Назва дисципліни	Модельні методи в фізиці металів
Адреса викладання дисципліни	вул. Кирила і Мефодія 8, 79005, м. Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	фізичний факультет, кафедра фізики металів
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	Галузь знань – 10 Природничі науки Спеціальність – 104 Фізика та астрономія
Викладачі дисципліни	професор кафедри фізики металів Якібчук Петро Миколайович, д.ф.-м.н.
Контактна інформація викладачів	petro.yakibchuk@lnu.edu.ua https://physics.lnu.edu.ua/employee/yakibchuk
Консультації по курсу відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через електронну пошту.
Сторінка курсу	https://physics.lnu.edu.ua/course/modelni-metody-v-fizytsi-metaliv-104-fizyka-ta-astronomiia-op-eksperymentalna-fizyka
Інформація про курс	Дисципліна «Модельні методи в фізиці металів» є вибірковою дисципліною з спеціальності 104 «Фізика та астрономія» для другого (магістерського) рівня вищої освіти, яка викладається в 2 семестрі в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація дисципліни	Дисципліна «Модельні методи в фізиці металів» розроблена таким чином, щоб надати учасникам відповідні теоретичні знання, уміння, навички, загальні та фахові компетентності для продукування нових ідей, розв'язання проблем у галузі фізики металів і матеріалознавства. Тому у курсі представлені відповідні теоретичні дані та передбачене виконання лабораторних робіт, пов'язаних з застосуванням квантово-механічних і класичних методів моделювання зонної структури металів, вивчення електричних та магнітних властивостей металів.
Мета та цілі дисципліни	Метою і завданням навчальної дисципліни «Модельні методи в фізиці металів» є навчити майбутніх спеціалістів володіти сучасними методами опису електронних властивостей металічних систем, а саме ознайомити їх з основними поняттями теорій Друде та Зоммерфельда. Навчити майбутніх спеціалістів самостійно проводити розрахунки енергетичного спектру та зонної структури металів із використанням низки методів, серед яких є метод лінійної комбінації атомних орбіталей, метод комірок, метод функцій Гріна, метод плоских хвиль, метод ортогоналізованих плоских хвиль та інші. Ознайомити студентів із методиками першопринципних розрахунків електронних властивостей металів за допомогою побудови рядів теорії збурень за псевдопотенціалом електрон-іонної взаємодії. Навчити студентів самостійно використовувати вищезгадані методи для теоретичного прогнозування та інтерпретації експерименту.
Література для вивчення дисципліни	Базова: <ol style="list-style-type: none"> 1. Якібчук П.М., Швець В.Т. Модельні методи в фізиці металів. Львів, ЛНУ. 2012. – 618 с. 2. Якібчук П.М. Фізика металів. Львів, видавничий центр ЛНУ ім. Івана Франка. 2000. – 103 с. 3. Поплавко Ю. М. П Фізика твердого тіла : підручник. В 2-х томах. / Ю. М. Поплавко. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, Вид-во «Політехніка», 2017. – Том 1: Структура, квазічастинки,

	<p>метали, магнетики. – 415 с.</p> <p>4. Mizutani, U. Introduction to the Electron Theory of Metals. Cambridge ;: Cambridge University Press, 2001. 604 p.</p> <p>5. Ваврух, М. В. Базисний підхід в теорії багатоелектронних систем [Текст] : [монографія] / М. Ваврух, П. Костробій, Б. Маркович ; Нац. ун-т "Львів. політехніка". - Львів : Растр-7, 2017. - 509 с.</p> <p>Допоміжна:</p> <p>1. Репецький С.П. Теорія твердого тіла. Електронні стани кристалів. Навчальний посібник. Київ, 2004.-102 с.</p> <p>2. Ваврух М.В., Крохмальський Т.Є. Базисний підхід в мікроскопічній теорії металів (огляд). - Фізичний збірник НТШ, 1993: т.1, с.30-68.</p> <p>3. Якібчук П.М. Врахування кореляційних ефектів у мікроскопічній теорії металів / П. Якібчук, Ваврух М., Смеречинський С., Тишко Н. // Вісник Львів. ун-ту. серія фізична. – Вип. 48. – 2013. – С. 57-78.</p> <p>4. Електронна структура невідпорядкованих перехідних металів у теорії розсіяння. / Якібчук П.М., Волков О. В., Вакарчук С. О. // ЖФД, Т. 9, № 2, 2005, С. 118–123.</p> <p>5. Dreizler R. M. and Gross E. K. Density Functional Theory. – Berlin: Springer, 1990. – 312 p.</p> <p>Інформаційні ресурси:</p> <p>1. Інформаційні ресурси:</p> <p>2. http://www.nbuv.gov.ua/ – Національна бібліотека України імені В.І. Вернадського.</p> <p>3. http://www.lsl.lviv.ua/ - Львівська національна наукова Бібліотека України імені В. Стефаника</p> <p>4. https://lnulibrary.lviv.ua/ - Наукова бібліотека Львівського національного університету імені Івана Франка</p>
Обсяг курсу	90 годин, з яких 32 годин аудиторних занять, з них 16 годин лекцій, 16 годин лабораторних занять, та 58 години самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>В результаті вивчення цього курсу студент буде</p> <p>знати: традиційні методи розрахунку зонної структури твердих тіл: метод лінійної комбінації атомних орбіталей, метод комірок, метод приєднаних плоских хвиль, метод плоских, ортогоналізованих та повністю ортогоналізованих плоских хвиль тощо.</p> <p>вміти: оцінювати властивості електронного газу в основному стані, розраховувати його термодинамічні властивості; оцінювати електростатичну провідність, термо-е.р.с. металів; проводити класифікацію твердих тіл на діелектрики, напівпровідники та метали у залежності від особливостей зонної будови таких систем; застосовувати відповідний метод розрахунку зонної структури у залежності від типу досліджуваного об'єкту; проводити розрахунки формфакторів псевдопотенціалів; проводити процедуру екранування локальних та нелокальних модельних потенціалів; вибирати оптимальну модель та метод розрахунку параметрів першопринципних потенціалів та псевдопотенціалів.</p>
Ключові слова	Модельні методи, псевдопотенціали, модельний потенціал, формфактор
Формат курсу	Очний
	проведення лекцій, лабораторних робіт та консультації для кращого розуміння тем

Теми	Наведено у табл.1 і табл. 2
Підсумковий контроль, форма	залік в кінці семестру
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти 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.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Використовуються такі методи навчання: а) <i>словесні</i> – лекція, пояснення, бесіда, інструктаж (вступний та поточний) під час виконання лабораторних робіт; б) <i>наочні</i> – ілюстрування лекційного матеріалу таблицями, схемами та графіками; в) <i>практичні</i> – виконання лабораторних робіт, що передбачає організацію навчальної роботи для отримання нових знань, перевірки певних наукових гіпотез на рівні досліджень, узагальнень та аналізу та формування вмінь і навичок інтерпретації результатів досліджень різноманітних об'єктів.
Необхідне обладнання	персональний комп'ютер, операційні системи (Windows, Linux), спеціальне програмне забезпечення (Abinit, Quantum ESPRESSO, LAMMPS), загальнонавчальні комп'ютерні програми, проектор
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням: • лабораторні заняття: 80% семестрової оцінки; максимальна кількість балів 80 • контрольні роботи 20% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів 20. Підсумкова максимальна кількість балів 100. Академічна доброчесність здобувачами вищої освіти передбачає самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання. Списування, втручання в роботу інших студентів становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної недоброчесності. Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій чи усній роботі студента є підставою для її незарахування викладачем, незалежно від масштабів обману. Відвідання занять є важливою складовою навчання. Очікується, що всі студенти відвідають усі лекції і практичні заняття курсу. Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття. У будь-якому випадку студенти зобов'язані дотримуватися усіх строків, визначених для виконання усіх видів робіт, передбачених курсом. Література. Усю література, яку студенти не зможуть знайти самостійно, буде надано викладачами виключно в освітніх цілях без права її передавання третім особам. Студенти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих. Політика виставлення балів. Враховуються бали, набрані на практичних та поточному тестуванні. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час заняття; недопустимість пропусків та запізнь на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими

	<p>мобільними пристроями під час заняття в цілях, не пов'язаних із навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін.</p> <p>Жодні форми академічної недоброчесності не толеруються.</p>
Питання на контрольні роботи	<ol style="list-style-type: none"> 1. Обчислення псевдопотенціалів з перших принципів. 2. Властивості псевдопотенціалів. 3. Вирахування енергетичного спектру. 4. Теплопровідність та електропровідність металу в моделі Друде. 5. Закон Відемана-Франца в моделі Зомерфельда. 6. Властивості електронного газу в основному стані. 7. Теорія металів Зоммерфельда. 8. Модельний потенціал Ашкрофта. 9. Розрахунок формфакторів нелокального МП. 10. Метод ортогоналізованих плоских хвиль. 11. Сфера Фермі. Енергія основного стану. 12. Факторизація формфакторів МП. 13. Метод псевдопотенціалу. 14. Наближення майже вільних електронів. 15. Модельний потенціал Краско-Гурського. 16. Метод плоских хвиль. 17. Електрон в періодичному полі. Теорема Блоха. 18. МП Хейне-Абаренкова. 19. Модель Друде. 20. Модельний потенціал Шоу. 21. Властивості псевдопотенціала. 22. Термоелектричний ефект (Ефект Зеєбека). 23. Властивості електронного газу в основному стані. 24. Псевдопотенціал перехідних металів. 25. Статична електропровідність металу. 26. Наближення сильного зв'язку. 27. Визначення параметрів МП. 28. Побудова та обчислення нелокального модельного потенціалу. 29. Модельний потенціал Хайне-Абаренкова. 30. Екранування нелокального модельного потенціалу. 31. Екранування локального МП. 32. Модельний потенціал точкового іона. 33. Теплопровідність металу. Закон Відемана-Франца. 34. Метод модельного потенціалу в теорії металів 35. Факторизація формфакторів МП 36. Наближення: сфери Фермі, розсіювання вперед та назад. 37. Обчислення псевдопотенціалів з перших принципів. 38. Властивості псевдопотенціалів. 39. Вирахування енергетичного спектру. 40. Обчислення формфакторів екранованого МП. 41. Модельний потенціал Краско-Гурського. 42. Статична електропровідність металу.
Опитування	<p>Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.</p>

Схема курсу «Модельні методи в фізиці металів»

Тижні	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1-2	Тема 1. Модель майже вільних електронів.	Лекції – 2 год. самостійна робота – 7 год.	2 тижні
3-4	Тема 2. Наближення сильного зв'язку.	Лекції – 2 год. самостійна робота – 7 год.	2 тижні
5-6	Тема 3. Метод плоских хвиль.	Лекції – 2 год. самостійна робота – 7 год.	2 тижні
7-7	Тема 4. Метод ортогоналізованих плоских хвиль.	Лекції – 2 год. самостійна робота – 7 год.	2 тижні
9-10	Тема 5. Метод повністю ортогоналізованих плоских хвиль.	Лекції – 2 год. самостійна робота – 7 год.	2 тижні
11-12	Тема 6. Модель модельних потенціалів у теорії металів	Лекції – 2 год, самостійна робота – 8 год.	2 тижні
13-14	Тема 7. Формалізм методу псевдопотенціалу.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 8 год.	2 тижні
15-16	Тема 8. Розрахунок псевдопотенціалів з «перших принципів».	Лекції – 2 год, самостійна робота – 7 год.	2 тижні

Таблиця 2

Теми лабораторних занять

Тижні	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1-2 3-4	Вступне заняття. Обчислення формфакторів модельного потенціалу.	лаборат. заняття – 4 год.	4 тижні
5-6, 7	Термодинамічні властивості вільного електронного газу.	лаборат. заняття – 3 год.	3 тижні
8-9, 10	Визначення параметрів модельного потенціалу.	лаборат. заняття – 3 год.	3 тижні
11-12 13-14	Обчислення енергетичного спектру провідності електронів.	лаборат. заняття – 4 год.	4 тижні
15-16	Підсумкове заняття	захисне заняття – 2 год.	2 тижні