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

Затверджено
на засіданні кафедри загальної фізики
фізичного факультету
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 1 від 30.08.2023 р.)

Завідувач кафедри Василь СТАДНИК

Силабус
з навчальної дисципліни
«Моделювання фізичних властивостей кристалів та наноматеріалів»,
що викладається в межах
ОПП «Комп'ютерні технології в прикладній фізиці»
першого (бакалаврського) рівня вищої освіти
для здобувачів з спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Львів 2023

Назва дисципліни	Моделювання фізичних властивостей кристалів та наноматеріалів
Адреса викладання дисципліни	вул. Драгоманова, 19, 79005, м. Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	фізичний факультет, кафедра загальної фізики
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	Галузь знань – 10 Природничі науки Спеціальність – 105 Прикладна фізика та наноматеріали
Викладачі дисципліни	лектор: Щепанський Павло Андрійович, доцент кафедри загальної фізики, к.ф.-м.н.; лабораторні заняття проводить доц. Щепанський П.А.
Контактна інформація викладачів	pavlo.shchepanskyi@lnu.edu.ua
Консультації з дисципліни відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі консультації через електронну пошту або он-лайн засобами Microsoft Teams, Zoom.
Сторінка курсу	https://physics.lnu.edu.ua/academics/bachelor/curriculum-it-technologies-in-physics
Інформація про дисципліну	Дисципліна «Моделювання фізичних властивостей кристалів та наноматеріалів» є нормативною дисципліною для підготовки бакалавра за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали, яка викладається в VIII семестрі в обсязі 4 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація дисципліни	Дисципліна «Моделювання фізичних властивостей кристалів та наноматеріалів» висвітлює основні принципи і підходи моделювання атомних, молекулярних та кристалічних структур, одержання їх фізичних властивостей за допомогою сучасних методів комп'ютерних розрахунків та показує зв'язок структури з властивостями матеріалів.
Мета та цілі дисципліни	**Мета**: сформувати у студентів знання і навички щодо основ моделювання низькорозмірних та кристалічних структур і розрахунку їх фізичних властивостей. **Цілі**: ознайомити студентів з різними методами моделювання матеріалів і підходами до моделювання їх властивостей; виробити у студентів практичні навички розрахунку базових фізичних властивостей матеріалів на атомарному рівні.
Література для вивчення дисципліни	**Базова:** 1. Lee J.G. Computational Materials Science: An Introduction, Second Edition (2nd ed.). – CRC Press, 2016. – 376 p. 2. Li X.; Wang En-Ge. Computer simulations of molecules and condensed matter from electronic structures to molecular dynamics: World Scientific Publishing Company, 2018. – 280 p. 3. Сігова В.І., Алексєєв О.М. Основи комп'ютерного матеріалознавства: Навчальний посібник. – Суми: Вид-во СумДУ, 2008. – 207 с. **Допоміжна:** 1. Щепанський П.А, Рудиш М.Я. Моделювання фізичних властивостей матеріалів. Методичні вказівки до лабораторних робіт : [для студ. фіз. ф-ту] – Львів : Галич-Прес, 2022. – 52 с. 2. Carsky P., Urban M. *Ab Initio* Calculations: Methods and Applications in Chemistry: Springer Berlin Heidelberg, 2012. – 247 p. Додаткові матеріали також буде запропоновано для кожної теми окремо.

	Інформаційні ресурси: 1. https://en.wikipedia.org/wiki/Ab_initio_quantum_chemistry_methods 2. https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/documentation.html 3. https://avogadro.cc/docs/
Тривалість дисципліни	один семестр
Обсяг дисципліни	120 годин, з яких 64 год. аудиторних занять, з них 32 год. лекцій та 32 год. лабораторних занять та 56 год. самостійної роботи
Очікувані результати навчання	***Загальні компетентності (ЗК):*** **ЗК 1.** Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. **ЗК 2.** Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності. **ЗК 3.** Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово. **ЗК 5.** Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій. **ЗК 6.** Здатність до проведення досліджень на відповідному рівні. ***Спеціальні компетентності (СК):*** **СК 1**. Здатність брати участь у плануванні та виконанні наукових та науково-технічних проектів. **СК 4.** Здатність брати участь у впровадженні результатів досліджень та розробок. **СК 5.** Здатність до постійного розвитку компетентностей у сфері прикладної фізики, інженерії та комп'ютерних технологій. **СК 6.** Здатність використовувати сучасні теоретичні уявлення в галузі фізики для аналізу фізичних систем. **СК 7.** Здатність використовувати методи і засоби теоретичного дослідження та математичного моделювання в професійній діяльності. **СК 9.** Здатність планувати та створювати програмне забезпечення, використовуючи мови високого рівня. **СК 11.** Здатність моделювати фізичні системи та процеси. ***Програмні результати навчання (ПРН):*** **ПРН 01.** Знати і розуміти сучасну фізику на рівні, достатньому для розв'язання складних спеціалізованих задач і практичних проблем прикладної фізики. **ПРН 02.** Застосовувати сучасні математичні методи для побудови й аналізу математичних моделей фізичних процесів. **ПРН 04.** Застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, розробки приладів і наукоємних технологій. **ПРН 07.** Класифікувати, аналізувати та інтерпретувати науково технічну інформацію в галузі прикладної фізики. **ПРН 09.** Презентувати результати досліджень і розробок фахівцям і нефахівцям, аргументувати власну позицію. **ПРН 10.** Планувати й організовувати результативну професійну діяльність індивідуально і як член команди при розробці та реалізації наукових і прикладних проектів. **ПРН 11.** Знати цілі сталого розвитку та можливості своєї професійної сфери для їх досягнення, в тому числі в Україні. **ПРН 12.** Розуміти закономірності розвитку прикладної фізики, її місце в розвитку техніки, технологій і суспільства, у тому числі в розв'язанні екологічних проблем.

	ПРН 16. Вміти формалізувати фізичні задачі для реалізації комп'ютерного експерименту. Після завершення цієї дисципліни студент буде: **знати:** • методи моделювання матеріалів та принципи розрахунку їхніх фізичних властивостей; **вміти:** • моделювати прості системи з атомів та молекул, а також кристалічні системи та розраховувати їх фізичні властивості за допомогою методів молекулярної динаміки та квантово-хімічних методів; • інтерпретувати результати розрахунків з фізичної точки зору.
Ключові слова	комп'ютерне моделювання, розрахунки з перших принципів, комп'ютерне матеріалознавство, наноматеріали
Формат дисципліни	очний
Теми	Наведено у табл. 1.
Підсумковий контроль, форма	Підсумковий контроль: іспит у кінці семестру. Форма: письмово-усна.
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань із загальних дисциплін фізики, «Матаналіз», «Аналітична геометрія», «Обчислювальна техніка і програмування», «Диференціальні та інтегральні рівняння», «Чисельні методи».
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	лекції, презентації (ілюстрація, демонстрація), виконання лабораторних робіт, розповіді, пояснення, дискусія
Необхідне обладнання	персональний комп'ютер, загальновживані комп'ютерні програми і операційні системи, програмні пакети GAMESS-US, Avogadro, Chemcraft, проектор
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням: • робота на лабораторних заняттях під час семестру – 50 % сумарної оцінки. Максимальна кількість балів 50: • максимальна оцінка для лабораторних робіт № 1, 7 – 7 балів, градація оцінювання відповідно до такої шкали: • виконання лабораторної роботи – 2 бали; • правильне оформлення звіту – 2 бали; • захист лабораторної роботи – 3 бали з наступною градацією: • 3 – студент повністю володіє матеріалом; • 2 – студент добре володіє матеріалом, є незначні помилки; • 1 – студент частково володіє матеріалом; • 0 – студент не володіє матеріалом; • максимальна оцінка для лабораторної роботи № 2-6, 8 – 6 балів: • виконання лабораторної роботи – 2 бали, • правильне оформлення звіту – 1 бал, • захист лабораторної роботи – 3 бали з наступною градацією: • 3 – студент повністю володіє матеріалом; • 2 – студент добре володіє матеріалом, є незначні помилки; • 1 – студент частково володіє матеріалом; • 0 – студент не володіє матеріалом;

	• екзамен – 50 % сумарної оцінки. Максимальна кількість балів 50: • письмово-усна відповідь на 5 розгорнутих питань, з максимальною оцінкою 10 балів кожне. Оцінювання кожного питання здійснюється, виходячи з критеріїв: • 10 – студент повністю володіє матеріалом і здатен робити логічні висновки; • 7-9 – студент добре володіє матеріалом, є неістотні помилки, які виправляються при незначному втручанні викладача; • 4-6 – студент частково володіє матеріалом, є незначні помилки; • 1-3 – студент формулює основні поняття пов'язані з матеріалом; • 0 – студент не володіє матеріалом; 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 незарахуванння викладачем, незалежно від масштабів обману. **Відвідання занять** є важливою складовою навчання. Очікується, що всі студенти відвідають усі лекції і лабораторні 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 дисципліною. **Література**. Усю літературу, 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 лабораторних та екзамені. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час заняття; недопустимість пропусків та запізнень на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях, не пов'язаних із навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання та ін. **Додаткові бали** можна отримати за результатами неформального та/або інформального навчання по тематиці даного курсу. Визнання та зарахування результатів такого навчання відбувається у відповідності до наданих документів про неформальне та/або інформальне навчання. **Жодні форми академічної недоброчесності не толеруються.**
Питання до екзамену	1. Методи та принципи моделювання атомних систем різних масштабів. 2. Особливості моделювання низькорозмірних і наносистем. 3. Метод Монте-Карло. 4. Метод скінченних елементів. 5. Схема інтегрування рівнянь руху Ньютона для N-атомної системи в методі молекулярної динаміки.

	6. Чисельні алгоритми в методі молекулярної динаміки. 7. Алгоритм Верле. 8. Алгоритм Верле у швидкісний формі. 9. Алгоритм предиктор-коректор. 10. Алгоритм-схема пробігу молекулярної динаміки. 11. Попередні налаштування процесу молекулярної динаміки. 12. Ініціалізація. Вхідні параметри молекулярної динаміки. 13. Методи найкрутішого спуску та спряжених градієнтів. 14. Процес врівноваження в процедурі молекулярної динаміки. 15. Термодинамічні ансамблі у молекулярній динаміці. 16. Генерування даних молекулярної динаміки. 17. Функція радіального розподілу. Загальний вигляд для речовини в кристалічному, аморфному і рідкому станах. 18. Енергетичні характеристики атомних систем. 19. Квантово-механічний розгляд атомних систем. 20. Спрощення при розгляді n-електронної системи для розв'язання рівняння Шредінгера. 21. Властивості електронних хвильових функцій. 22. Наближення Борна-Оппенгеймера. 23. Оператор Гамільтона для n-електронної системи. 24. Розрахунок енергії n-електронної системи за методом Гартрі. 25. Наближення Гартрі-Фока. Застосування методу Гартрі-Фока. 26. Електронна густина. Теореми Хоенберга–Кона. 27. Самоузгоджена процедура знаходження електронної густини. 28. Оптимізація багатоелектронної системи. 29. Розрахунок зонно-енергетичної структури методом *ab initio*. 30. Розрахунок коливних та оптичних спектрів методом *ab initio*. 31. Моделювання збуджених електронних станів.
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенні дисципліни.

Таблиця 1

Схема дисципліни «Моделювання фізичних властивостей кристалів та наноматеріалів»

Тиждень	Тема занять	Форма діяльності та обсяг годин	Література	Термін виконання
1, 2	**Тема 1**. Вступ. Методи та принципи моделювання матеріалів	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 8 год.	Базова: 1, 3; Допоміжна: 1	2 тижні
3, 4	**Тема 2**. Методи молекулярної динаміки. Алгоритм-схема процедури молекулярної динаміки	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 7 год.	Базова: 1, 2	2 тижні
5, 6	**Тема 3**. Опис властивостей динамічних систем на базі молекулярної динаміки	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 7 год.	Базова: 1-3	2 тижні
7, 8	**Тема 4**. Моделювання квантово-механічних систем. Теоретичні основи	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 7 год.	Базова: 1, 2; Допоміжна: 1	2 тижні

9, 10	**Тема 5**. Методи *ab initio*. Наближені методи розв'язку рівняння Шредінгера. Ранні першопринципні розрахунки	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 7 год.	Базова: 1, 3; Допоміжна: 2	2 тижні
11-13	**Тема 6**. Теорія функціоналу густини. Розрахунки на базі ТФГ	Лекції – 6 год, лаб. заняття – 6 год, самостійна робота – 10 год.	Базова: 1, 3; Допоміжна: 1, 2	3 тижні
14-16	**Тема 7**. Розрахунок фізичних властивостей багатоатомних систем	Лекції – 6 год, лаб. заняття – 6 год, самостійна робота – 10 год.	Базова: 2, 3; Допоміжна: 1, 2	3 тижні