


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

Затверджено
на засіданні кафедри фізики твердого тіла
фізичного факультету
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 1 від 25 серпня 2023 р.)

Завідувач кафедри 
проф. Володимир КАПУСТЯНИК

**Силабус з навчальної дисципліни «Комп'ютерні методи
моделювання структури і фізичних властивостей»,
що викладається в межах ОНП «Експериментальна фізика»
другого (магістерського) рівня вищої освіти для здобувачів
зі спеціальності 104 «Фізика та астрономія»**

Львів 2023

**Силабус курсу «КОМП'ЮТЕРНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ І
ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ»
2023–2024 н.р.**

Назва курсу	Комп'ютерні методи моделювання структури і фізичних властивостей
Адреса викладання курсу	вул. Кирила і Мефодія 8, 79005 Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Фізичний факультет, кафедра фізики твердого тіла
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 Природничі науки / 104 Фізика та астрономія
Викладачі курсу	доцент кафедри фізики твердого тіла, к.ф.-м.н Коваленко Марія Василівна
Контактна інформація викладачів	mariya.kovalenko@lnu.edu.ua https://physics.lnu.edu.ua/employee/kovalenko-m-v
Консультації по курсу відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через електронну пошту та на платформі Microsoft Teams. Для погодження часу он-лайн консультацій слід написати на електронну пошту викладача або в чат Microsoft Teams
Сторінка курсу	https://physics.lnu.edu.ua/course/kompyuterni-metody-modelyuvannya-struktury-i-fizychnyh-vlastyvostej-fizyka
Інформація про курс	Дисципліна «Комп'ютерні методи моделювання структури і фізичних властивостей» є нормативною дисципліною зі спеціальності 104 Фізика та астрономія для ОНП «Експериментальна фізика» для другого (магістерського) рівня вищої освіти, яка викладається в 2 семестрі в обсязі 4,5 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація курсу	Курс «Комп'ютерні методи моделювання структури і фізичних властивостей» розроблено таким чином, щоб надати учасникам відповідні теоретичні знання, уміння, навички, загальні та фахові компетентності для продукування нових ідей, розв'язання комплексних проблем у галузі обчислювальної фізики. Тому у курсі представлені відповідні теоретичні дані та передбачене розв'язання практичних задач, пов'язаних зі застосуванням квантово-механічних і класичних моделей твердих тіл і наноструктур на їхній основі для моделювання структурних, електронних та фізичних властивостей таких структур.
Мета та цілі курсу	Метою вивчення нормативної дисципліни «Комп'ютерні методи моделювання структури і фізичних властивостей» є оволодіння студентами основними фундаментальними уявленнями про сучасні методики розрахунків та принципи моделювання у галузі фізики твердого тіла, а також формування в студентів вмінь та навиків практичної роботи з різними програмними пакетами для розв'язання конкретних завдань.
Література для вивчення дисципліни	Базова: 1. Lee J. D. Computational materials science: an introduction / J. G. Lee – Second edition. Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis, 2017. – 351 p.

2. Martin R. Electronic Structure. Basic theory and practical methods / R. Martin. – Cambridge, 2nd Edition. – 2020. – 788 p.
3. Handbook of nanophysics. Principles and methods, V.1 / editor Klaus D. Sattler. – Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis, 2011. – 760 p.
4. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підруч. для студ. ВНЗ / П.Є. Стрижак. – К. : Вид. дім "Києво-Могилянська академія", 2009. – 458 с.
5. Varga K. Computational Nanoscience: Applications for Molecules, Clusters, and Solids / K. Varga, J. A. Driscoll. – Cambridge: Cambridge University Press, 2011. – 431 p.
6. Коваленко М.В. Комп'ютерні методи моделювання структур та фізичних властивостей [Електронний ресурс] : електронний навчальний курс / М.В. Коваленко. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2021. – Режим доступу: <https://e-learning.lnu.edu.ua/course/view.php?id=3455>

Допоміжна:

1. Погосов В.В. Елементи фізики поверхні, наноструктур і технологій / В.В. Погосов, Ю.А. Куницький, А.В. Бабіч, А.В. Коротун. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2010. – 365 с.
2. Handbook of materials modeling / editor S. Yip. – Springer, 2020. – 2965 p.
3. Atomic-Scale Modeling of Nanosystems and Nanostructured Materials: Lecture Notes in Physics / editors C. Massobrio, H. Bulou, Ch. Goyhenex. – Berlin Heidelberg: Springer, 2010. – 374 p.
4. Погосов В.В. Нанofізика і нанотехнології / В.В. Погосов, Ю.А. Куницький, А.В. Бабіч, А.В. Коротун, А.П. Шпак. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2011. – 380 с.
5. Заячук Д.М. Низькорозмірні структури і надгратки / Д.М. Заячук. – НУ „Львівська політехніка”, 2006. – 220 с.
6. Marx D. Ab initio molecular dynamics: basic theory and advanced methods / D. Marx & J. Hutter. – Cambridge University Press, Cambridge, 2009. – 567 p.
7. Brázdová V. Atomistic Computer Simulations: A Practical Guide / V. Brázdová, D. R. Bowler. – Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2013. – 341 p.

Інформаційні ресурси:

1. www.nanohub.org
2. <https://www.samson-connect.net/>
3. www.quantum-espresso.org
4. www.skybox.net.ua
5. www.nbu.gov.ua/portal/natural/nano/

Тривалість курсу	один семестр
Обсяг курсу	135 годин, з яких 32 годин аудиторних занять, з них 16 годин лекцій, 16 годин лабораторних занять, та 103 години самостійної роботи
Очікувані результати навчання	В результаті вивчення цього курсу здобувач має оволодіти такими компетентностями:

Загальні компетентності (ЗК):

ЗК01. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК02. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК03. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК04. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК05. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

ЗК06. Здатність виявляти, ставити та вирішувати проблеми.

ЗК07. Здатність проведення досліджень на відповідному рівні.

Спеціальні (фахові) компетентності (СК):

СК01. Здатність використовувати закони та принципи фізики та/або астрономії у поєднанні із потрібними математичними інструментами для опису природних явищ.

СК02. Здатність формулювати, аналізувати та синтезувати рішення наукових проблем у галузі фізики та/або астрономії.

СК05. Здатність сприймати новоздобуті знання у галузі фізики та астрономії та інтегрувати їх з уже наявними, а також самостійно опановувати знання та навички, необхідні для розв'язання складних задач і проблем у нових для себе деталізованих предметних галузях фізики та/або астрономії й дотичних до них міждисциплінарних областях.

СК08. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі у галузі фізики та астрономії, вибирати відповідні методи для їх розв'язання, беручи до уваги наявні ресурси.

СК10. Здатність використовувати знання й уміння в галузі сучасних інформаційних технологій для вирішення експериментальних і практичних завдань фізики та астрономії.

Після засвоєння навчальної дисципліни аспіранти мають продемонструвати такі **програмні результати навчання**:

РН01. Використовувати концептуальні та спеціалізовані знання і розуміння актуальних проблем і досягнень обраних напрямів сучасної теоретичної та експериментальної фізики та/або астрономії для розв'язання складних задач і практичних проблем.

РН02. Проводити експериментальні та/або теоретичні дослідження з фізики та астрономії, аналізувати отримані результати в контексті існуючих теорій, робити аргументовані висновки (включаючи оцінювання ступеня невизначеності) та пропозиції щодо подальших досліджень.

РН04. Обирати і використовувати відповідні методи обробки та аналізу даних фізичних та/або астрономічних досліджень і оцінювання їх достовірності.

РН05. Здійснювати феноменологічний та теоретичний опис досліджуваних фізичних та/або астрономічних явищ, об'єктів і процесів.

РН06. Обирати ефективні математичні методи та інформаційні технології та застосовувати їх для здійснення досліджень та/або

	<p>інновацій у галузі фізики та/або астрономії.</p> <p>PH10. Відшукувати інформацію і дані, необхідні розв'язання складних задач фізики та/або астрономії, використовуючи різні джерела, зокрема, наукові видання, наукові бази даних тощо, оцінювати та критично аналізувати отриману інформацію та дані.</p> <p>PH11. Застосовувати теорії, принципи і методи фізики та/або астрономії для розв'язання складних міждисциплінарних наукових і прикладних задач.</p> <p>PH12. Розробляти та застосовувати ефективні алгоритми та спеціалізоване програмне забезпечення для дослідження моделей фізичних та/або астрономічних об'єктів і процесів, обробки результатів експериментів і спостережень.</p> <p>PH19. Вміння обробити, проаналізувати та пояснити фізичну інформацію, одержану за допомогою методів x-променевої дифракції, люмінесцентної й оптичної спектроскопії, моделювання, електронної мікроскопії, термічного аналізу.</p>
Ключові слова	Метод функціоналу густини, метод Монте-Карло, методи молекулярної динаміки, оптимізація геометрії, електронний спектр, оптичні властивості, дефекти.
Формат курсу	Очний
	проведення лекцій, лабораторних робіт та консультації для кращого розуміння тем
Теми	Наведено у табл.1 і табл. 2
Підсумковий контроль, форма	іспит 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, фундаментальних проблем квантової механіки, фізичної кристалографії, електронної будови і оптики кристалів та комп'ютерних технологій для розв'язку практичних завдань; володіти навиками пошуку та опрацювання спеціалізованої літератури, розв'язку алгебраїчних і диференціальних 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 презентаціями, що включають в себе таблиці, схеми та графіки; в) <i>лабораторні</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 (Quantum ESPRESSO, Burai), загальноживані комп'ютерні програми, проектор
Критерії оцінювання (окремо для кожного)	Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:

виду навчальної діяльності)

- лабораторні: 35 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів 35 (7 лабораторних по 5 балів);
- контрольні роботи: 15 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів 15 (контрольна робота по зм. модулю № 1 – 7 балів, по зм. модулю №2 – 8 балів);
- іспит: 50% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів 50.

Підсумкова максимальна кількість балів 100.

Критерії оцінювання лабораторних робіт:

7 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на високому рівні;

5-6 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на достатньо високому рівні;

4 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на задовільному рівні;

2-3 б. – студент частково виконав завдання і володіє матеріалом на задовільному рівні;

1 б. – студент частково виконав завдання і тільки частково володіє матеріалом;

0 б. – студент не виконав завдання.

Контрольна робота – максимально 7 балів:

7 б. – студент повністю володіє матеріалом;

4-6 б. – студент достатньо володіє матеріалом;

1-3 б. – студент частково володіє матеріалом;

0 б. – студент не володіє матеріалом.

Контрольна робота – максимально 8 балів:

8 б. – студент повністю володіє матеріалом;

5-7 б. – студент достатньо володіє матеріалом;

1-4 б. – студент частково володіє матеріалом;

0 б. – студент не володіє матеріалом.

Іспит – максимально 50 балів:

Іспит проводиться у змішаній формі: тестування та усна відповідь на питання.

У тесті 20 питань по 1 балу кожне.

У білеті 2 питання (по 15 балів, кожне).

Критерії оцінювання описових питань іспиту:

15 б. – студент повністю володіє матеріалом;

10-14 б. – студент достатньо володіє матеріалом;

7-10 б. – студент частково володіє матеріалом;

1-5 б. – студент має базові знання матеріалу;

0 б. – студент не володіє матеріалом.

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.

Додаткові 10 балів студент також може отримати за публікацію статті або особисту участь у науковій конференції за тематикою курсу за умови, що загальне число набраних балів не перевищуватиме 100 балів.

Академічна доброчесність: очікується, що роботи студентів будуть їхніми оригінальними дослідженнями чи міркуваннями. Списування,

	<p>втручання в роботу інших студентів, відсутність посилянь на використанні джерела становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної не доброчесності. Виявлення ознак академічної не доброчесності в роботах студента є підставою для її не зарахування викладачем, незалежно від масштабів плагіату чи обману. Відвідування 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 курсом. Література: уся література, яку студенти не зможуть знайти самостійно. Буде надана викладачем виключно в освітніх цілях без права передачі її третім особам. Студенти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.</p> <p>Політика встановлення балів. Враховуються бали набрані за виконання та захист лабораторних робіт і самостійної роботи. При цьому враховується присутність на заняттях та активність студента під час виконання лабораторної роботи; списування та плагіат; користування мобільними пристроями в цілях не пов'язаних з навчанням; несвоєчасне виконання поставленого завдання. Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються.</p>
<p>Питання до екзамену</p>	<ol style="list-style-type: none"> 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 проводиться оптимізація структури? 5. Види псевдопотенціалів. 6. Види обмінно-кореляційних потенціалів. 7. Яка перевага ультрам'яких псевдопотенціалів над нормозберігаючими? 8. Що означає розрахунок «з перших принципів»? 9. Якими методами можна скористатися для часозалежних розрахунків? 10. Фізичний зміст граничної кінетичної енергії? 11. В чому полягає суть збіжності самоузгоджених розрахунків? 12. Що показує густина станів? 13. Що описує термін «електронна структура»? 14. Для спрощення багаточастинкових розрахунків, яке використовують наближення? 15. Яким рівнянням описується енергія основного стану в теорії функціонала густини? 16. Всі потенціали, що входять в рівняння Шредінгера відповідно до теорією функціонала густини є функцією... 17. Для яких систем використовують наближення суперкомірки? 18. Для чого у моделі суперкомірки використовують вакуумну щілину? 19. Набір k-точок у DFT визначається по схемі...

	<p>20. Зонно-енергетична структура твердого тіла.</p> <p>21. Які властивості кристалу можна розрахувати на основі зонно-енергетичної діаграми?</p> <p>22. Методи розрахунку одноелектронних станів кристалу. Метод МО-ЛКАО.</p> <p>23. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока. Локальне наближення для обмінного потенціалу. Типи базисних функцій і матричних елементів оператора Фока.</p> <p>24. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона. Теорія Томаса-Фермі.</p> <p>25. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини.</p> <p>26. Метод псевдопотенціалу. Формалізм плоских хвиль.</p> <p>27. Сучасні методи врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної взаємодії. Обмінно-кореляційні функціонали. Параметричні функціонали.</p> <p>28. Аналітичні та чисельні методи оптимізації геометрії (метод найшвидшого спуску, метод спряжених градієнтів.)</p> <p>29. Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля.</p> <p>30. Кластерні методи. Ха - метод. Кластерне наближення та його застосування.</p> <p>31. Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки.</p> <p>32. Моделювання Кара-Парінелло.</p> <p>33. Моделювання точкових дефектів. Електронна структура твердих тіл біля поверхні. Стани Тамма і Шоклі.</p> <p>34. Розрахунок електростатичної енергії іонного кристалу методом Евальда.</p> <p>35. Аналіз хімічного зв'язку. Аналіз заселеності по Маллікену і альтернативні схеми розподілу заряду.</p> <p>36. Аналіз хімічного зв'язку на основі розподілу електронної густини. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини.</p> <p>37. Спектр уявної частини діелектричної проникності за результатами зонного розрахунку.</p> <p>38. Аналіз Крамерса-Кроніга. Розрахунок оптичних спектрів.</p> <p>39. Атомні та пружні характеристики твердих тіл.</p> <p>40. Ab initio розрахунки фононних спектрів кристалів і надграток.</p> <p>41. Обчислення енергетичних характеристик і термодинамічних функцій, передбачення стійкості системи.</p> <p>42. Розрахунок деяких характеристик ІЧ, ЕПР, ЯМР, ЯГР –спектрів.</p> <p>43. Вплив зовнішніх полів (температура, тиск, магнітне поле) на зонно-енергетичну структуру твердих тіл.</p> <p>44. Розподіли густини станів вуглецевих нанотрубок</p> <p>45. Розрахунок параметрів екранування далекодіючого кулонівського вкладу в потенціал парної міжіонної взаємодії.</p>
<p>Опитування</p>	<p>Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.</p>

Схема курсу «Комп'ютерні методи моделювання структури і фізичних властивостей»

Тиждень	Тема	Форма діяльності та обсяг годин	Література	Термін виконання
1,2	<p>Вступ Структурно-часова ієрархія фізико-хімічних процесів формування напівпровідникових наноструктур. Квантова механіка наносистем. Квантоворозмірні ефекти в нанооб'єктах. Квазічастинки у твердому тілі та у наноструктурованих матеріалах.</p> <p>Тема 1. Методи розрахунку одноелектронних станів квантових систем Квантомеханічні моделі реальних об'єктів та основні методи розрахунків їх властивостей. Адіабатичне наближення. Теорема Блоха. Область нееквівалентних значень хвильового вектора. Зона Бриллюена. Граничні умови. С.Р. Вивчення матеріалу лекції. Фізичні механізми формування властивостей наноматеріалів.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 6 год	Базова: 1, 2, 6; Допоміжна: 1, 4	2 тижні
3,4	<p>Тема 2. Метод функціоналу густини Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока. Локальне наближення для обмінного потенціалу. Типи базисних функцій і матричних елементів оператора Фока. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона. Теорія Томаса-Фермі. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини. Метод псевдопотенціалу. Формалізм плоских хвиль. Сучасні методи врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної взаємодії. С.Р. Вивчення матеріалу лекції. Основи методу функціоналу густини.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 8 год	Базова: 2, 3, 6; Допоміжна: 2, 3	2 тижні
5,6	<p>Тема 3. Напівемпіричні методи розрахунку Метод молекулярних орбіталей</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 6 год	Базова: 5, 6; Допоміжна: 3	2 тижні

	Хюккеля. Розширений метод Хюккеля. Метод сильного зв'язку. С.Р. Вивчення матеріалу лекції. Основи k-p методу.			
7,8	Тема 4. Емпіричні методи розрахунку Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки. Парні потенціали. Багаточастинкові потенціали. Моделювання Кара-Парінілло. Зв'язок розрахованих параметрів та експериментально вимірюваних характеристик. С.Р. Вивчення матеріалу лекції. Моделювання різних термодинамічних ансамблів в молекулярній динаміці	Лекції – 2 год, самостійна робота – 8 год	Базова: 1, 2, 6; Допоміжна: 6	2 тижні
9,10	Тема 5. Статистичні методи розрахунку Метод Монте-Карло. Статистичні ансамблі. Кінетичне Монте-Карло моделювання. Міграція атомів по поверхні як процес випадкового блукання. Енергія активації і частота стрибків. Ймовірності елементарних подій. Основні алгоритми кінетичного Монте-Карло моделювання. С.Р. Вивчення матеріалу лекції. Алгоритм Метрополіса.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 8 год	Базова: 2, 3, 6; Допоміжна: 2	2 тижні
11,12	Тема 6. Аналіз результатів розрахунків властивостей наноструктур Підходи до аналізу результатів розрахунків енергетичної структури квантових систем. Електронна структура твердих тіл біля поверхні. Стани Тамма і Шоклі. Основні пакети програм для виконання чисельних задач у фізиці наноструктур. С.Р. Вивчення матеріалу лекції. Моделювання електронного спектру наноструктур різної геометрії.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 6 год	Базова: 4, 3, 6; Допоміжна: 3	2 тижні
13,14	Тема 7. Топологічне моделювання наноструктур Молекулярне конструювання. Комп'ютерна візуалізація нанооб'єктів. Аналіз заселеності за	Лекції – 2 год, самостійна робота – 6 год	Базова: 1, 2, 6; Допоміжна: 2	2 тижні

	Маллікеном і альтернативні схеми розподілу заряду. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини. С.Р. Вивчення матеріалу лекції. Визначення геометрії та граничних умов для структур різної розмірності.			
15, 16	Тема 8. Розрахунок спектральних характеристик наноструктур Розрахунок оптичних спектрів. Атомні та пружні характеристики. Енергетичний спектр низькорозмірних систем в електричному і магнітному полях. С.Р. Вивчення матеріалу лекції. Вплив пружних деформацій на властивості гетероструктур з квантовими точками.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 7 год	Базова: 2, 4, 6;	2 тижні

Таблиця 2

Теми лабораторних занять

Тиждень	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1	Розрахунок з перших принципів параметрів ґратки на прикладі напівпровідникової сполуки.	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год	2 тижні
3	Комп'ютерне моделювання зонно-енергетичної структури та густини станів наноматеріалів	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 8 год	2 тижні
5, 7	Моделювання процесу адсорбції молекул на металевій поверхні	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 8 год	4 тижні
9	Моделювання та розрахунки оптичних властивостей наноматеріалів	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год	2 тижні
11	Розрахунок з перших принципів констант пружності та інших механічних властивостей напівпровідникових кристалів.	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год	2 тижні
13	Розрахунки з перших принципів фононних спектрів феромагнітних сполук	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 8 год	2 тижні
15	Комп'ютерне моделювання густини заряду наноматеріалів	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год	2 тижні