

Кафедра фізики твердого тіла

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Декан фізичного факультету

\_\_\_\_\_ проф. Якібчук П.М.

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2018 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**КОМП'ЮТЕРНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУР ТА  
ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ**

підготовки магістра

з галузі знань 10 Природничі науки

за спеціальністю 104 Фізика та астрономія

фізичного факультет

Робоча програма **Комп'ютерні методи моделювання структур та фізичних властивостей** для студентів за спеціальністю 104 Фізика та астрономія.

Розробник:

Коваленко М.В., канд. фіз.-мат. наук, доцент кафедри фізики твердого тіла

Робочу програму схвалено на засіданні кафедри фізики твердого тіла

Протокол від “ \_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2018 року № \_\_\_\_

Завідувач кафедри фізики твердого тіла

\_\_\_\_\_ (проф. Капустяник В.Б.)  
(підпис) (прізвище та ініціали)

Ухвалено Вченою радою фізичного факультету

Протокол від “ \_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ року № \_\_\_\_

### 1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
		<i>денна форма навчання</i>
Кількість кредитів – 4,5	галузь знань 10 Природничі науки	Нормативна
Модулів – 1	Спеціальність 104 Фізика та астрономія	<i>Рік підготовки:</i> <b>5-й</b>
Змістових модулів – 2		<i>Семестр</i>
Загальна кількість годин - 135		<b>9-й</b> <i>Лекції</i>
Тижневих годин для денної форми навчання:		<b>16 год.</b>
<i>Аудиторних:</i>		<i>Практичні</i>
9 семестр – 2 год	Освітньо-кваліфікаційний рівень:	<i>Лабораторні</i>
<i>Самостійної роботи студента:</i>	<b>магістр</b>	<b>16 год.</b>
9 семестр – 6,4 год		<i>Самостійна робота</i>
		<b>103 год.</b>
		<i>Вид контролю: іспит</i>

## **2. Мета та завдання навчальної дисципліни**

**Мета:** дати теоретичні основи і сформувати практичні навички використання комп'ютерних методів у моделюванні фізичних властивостей твердих тіл.

**Завдання:** ознайомити студентів з квантомеханічними моделями реальних об'єктів та основними методами розрахунків їх властивостей, зокрема, з першопринципними, напівемпіричними та емпіричними методами розрахунку енергетичної структури, оптичних спектрів, атомних та пружних характеристик твердих тіл. Увага приділяється моделюванню точкових дефектів, аналізу хімічного зв'язку в рамках різних підходів. Розглядаються основні пакети програм для виконання чисельних задач у фізиці твердого тіла.

В результаті вивчення даного курсу студент повинен

**знати** основні методи комп'ютерного моделювання фізичних властивостей твердих тіл; основні напрямки постановки і моделювання типових, оригінальних і проблемних фізичних задач та процесів та візуалізації результатів розрахунків;

**вміти:** використовувати отримані знання на практиці при розв'язанні завдань теоретичного та прикладного характеру, а саме: побудувати математичну модель фізичної задачі та процесу в інтегральному середовищі розробника програм та розрахувати необхідні дані, провести візуалізацію результатів розрахунків.

Для вивчення дисципліни необхідні знання одержані при вивченні загальних та спеціальних дисциплін спеціальності, насамперед “Математичного аналізу”, “Векторного аналізу”, “Атомної фізики”, “Термодинаміки і статистичної фізики”, “Фізики твердого тіла”, “Теоретичної механіки”, “Квантової механіки”.

## **3. Програма навчальної дисципліни**

### **МОДУЛЬ 1**

#### **Змістовий модуль 1. Методи розрахунку зонно-енергетичної структури твердих тіл**

##### **Вступ**

Структурно-часова ієрархія фізико-хімічних процесів формування напівпровідникових наноструктур. Квантова механіка наносистем. Квантоворозмірні ефекти в наноб'єктах. Квазічастинки у твердому тілі та у наноструктурованих матеріалах.

##### **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.

## **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.

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

Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля. Метод сильного зв'язку.

## **Тема 4. Емпіричні методи розрахунку**

Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки. Парні потенціали. Багаточастинкові потенціали. Моделювання Кара-Парінелло. Зв'язок розрахованих параметрів та експериментально вимірюваних характеристик.

## **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.

# ***Змістовий модуль 2. Моделювання фізичних властивостей твердих тіл***

## **Тема 1. 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.

## **Тема 2. Топологічне моделювання наноструктур**

Молекулярне конструювання. Комп'ютерна візуалізація нанооб'єктів. Аналіз заселеності за Маллікеном і альтернативні схеми розподілу заряду. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини.

## **Тема 3. Розрахунок спектральних характеристик наноструктур**

Розрахунок оптичних спектрів. Атомні та пружні характеристики. Енергетичний спектр низькорозмірних систем в електричному і магнітному полях.

#### **4. Структура навчальної дисципліни**

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Усього	Денна форма				
		у тому числі				
1	2	л	п	лаб	інд	ср
		3	4	5	6	7
<b>МОДУЛЬ 1</b>						
<b>Змістовий модуль 1. Методи розрахунку зонно-енергетичної структури твердих тіл</b>						
Тема 1. Методи розрахунку одноелектронних станів квантових систем	16	2		2		12
Тема 2. Метод функціоналу густини	18	2		2		14
Тема 3. Напівемпіричні методи розрахунку	18	2		2		14
Тема 4. Емпіричні методи розрахунку	18	2		2		14
Тема 5. Статистичні методи розрахунку	18	2		2		14
<i>Разом – зм. модуль 1</i>	<b>88</b>	<b>10</b>		<b>10</b>		<b>68</b>
<b>Змістовий модуль 2. Моделювання фізичних властивостей твердих тіл</b>						
Тема 1. Аналіз результатів розрахунків властивостей наноструктур	18	2		2		14
Тема 2. Топологічне моделювання наноструктур у	16	2		2		12
Тема 3. Розрахунок спектральних характеристик наноструктур	13	2		2		9
<i>Разом – зм. модуль 2</i>	<b>47</b>	<b>6</b>		<b>6</b>		<b>35</b>
<b>Усього годин</b>	<b>135</b>	<b>16</b>		<b>16</b>		<b>103</b>

#### **5. Темі семінарських занять**

Семінарських занять в курсі не передбачено

#### **6. Темі практичних занять**

Практичні заняття в курсі не передбачені.

## 7. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
<b>I семестр</b>		
1	Вступне заняття	1
2	Розрахунок з перших принципів параметрів ґратки на прикладі напівпровідникової сполуки.	2
3	Комп'ютерне моделювання зонно-енергетичної структури та густини станів наноматеріалів	2
4	Моделювання процесу адсорбції молекул на поверхні металевій сполуки	2
5	Моделювання та розрахунки оптичних властивостей наноматеріалів	2
6	Розрахунок еластичних констант напівпровідникових кристалів.	2
7	Розрахунки фононних спектрів феромагнітних сполук	2
8	Комп'ютерне моделювання густини заряду наноматеріалів	2
10	Заключне заняття	1
	<b>Разом</b>	<b>16</b>

## 8. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
<b>I семестр</b>		
1	Фізичні механізми формування властивостей наноматеріалів	12
2	Основи методу функціоналу густини.	14
3	Основи k-p методу	14
4	Моделювання різних термодинамічних ансамблів в молекулярній динаміці	14
5	Алгоритм Метрополіса	14
6	Моделювання електронного спектру наноструктур різної геометрії.	14
7	Визначення геометрії та граничних умов для структур різної розмірності	12
8	Вплив пружних деформацій на властивості гетероструктур з квантовими точками	9
	<b>Разом</b>	<b>72</b>

## 10. Методи контролю

Контроль засвоєння матеріалу включає поточний контроль (проміжний контроль за двома змістовими модулями – 10 балів), оцінку відповідей та роботи на лабораторних заняттях та самостійна робота (4×10=40 балів) — разом за семестр 50 балів; іспит — 50 балів. Сумарна оцінка за семестр виставляється за 100-бальною шкалою.

## *11. Розподіл балів, що присвоюються студентам*

*Приклад розподілу балів, які отримують студенти (для заліку)*

Поточне тестування та самостійна робота								Робота на лабораторних	Підсумковий тест (іспит)	Сума
Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2								
T1	T2	T1	T2	T3	T4	T5	T6			
2	2	4	2	2	2	2	4	30	50	100

### Шкала оцінювання: національна та ЄКТС

Оцінка ЄКТС	Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, курсового проекту (роботи), практики	для заліку
A	90 – 100	відмінно	зараховано
B	81-89	добре	
C	71-80		
D	61-70	задовільно	
E	51-60		
FX	21-50	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
F	0-20	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни



## ***13. Рекомендована література***

### **Базова**

1. В.В. Погосов, Ю.А. Куницький, А.В. Бабіч, А.В. Коротун, А.П. Шпак "Нанофізика і нанотехнології", Запоріжжя: ЗНТУ, 2011. - 380 с.
2. А.П.Шпак, Ю.А.Куницький, О.О.Коротченков, С.Ю.Смик. Квантові низькорозмірні системи. К.: Академперіодика, 2003.- 310 с.
3. [Д.М.Заячук. Низькорозмірні структури і надгратки. НУ „Львівська політехніка”, 2006. – 220 с.](#)
4. [R.Martin Electronic Structure. Basic theory and practical methods. – Cambridge – 2004. – 642 p.](#)
5. [Computational materials science: an introduction / June Gunn Lee // Second edition. | Boca Raton : CRC Press, Taylor & Francis, 2017. – 351 p.](#)
6. [Н.Ф.Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. М., Мир, Изд-во Моск. ун-та, 2001.](#)
7. [Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. - М.: Наука, 1995.-144 с.](#)
8. Стрижак П.Є. Квантова хімія : Підруч. для студ. ВНЗ. – К. : Вид. дім "Києво-Могилянська академія", 2009. – 458 с.
9. K. Varga and J. A. Driscoll, “Computational Nanoscience, Applications for Molecules, Clusters, and Solids”, Cambridge University Press, Cambridge, 2011.
10. [D. Marx & J. Hutter, “Ab initio molecular dynamics: basic theory and advanced methods”, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.](#)

### **Допоміжна**

1. В.В. Погосов, Ю.А. Куницький, А.В. Бабіч, А.В. Коротун "Елементи фізики поверхні, нано- структур і технологій", 2010, Запоріжжя: ЗНТУ, 365 с.
2. В.А.Губанов, Э.З.Курмаев, А.Л.Ивановский. Квантовая химия твердого тела. М., Наука. 1984.
3. [Л.И.Ястребов, А.А.Канцельсон "Основы одноэлектронной теории твердого тела", Наука, М., 1981.](#)

## ***14. Інформаційні ресурси***

1. [www.nanohub.org](http://www.nanohub.org)
2. [www.znannya.org](http://www.znannya.org)
3. <http://nauka.name/>
4. [www.skybox.net.ua](http://www.skybox.net.ua)
5. [www.nbuv.gov.ua/portal/natural/nano/](http://www.nbuv.gov.ua/portal/natural/nano/)