

**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 № 7 від 1 червня 2021 р.)

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_



**Силабус з навчальної дисципліни «Комп'ютерні методи  
моделювання структур та фізичних властивостей»,  
що викладається в межах другого рівня вищої освіти для здобувачів  
з спеціальності 104 «Фізика та астрономія»**

**Львів 2021 р.**

**Силабус курсу «КОМП'ЮТЕРНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУР ТА  
ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ»  
2021–2022 н.р.**

<b>Назва курсу</b>	<b>Комп'ютерні методи моделювання структур та фізичних властивостей</b>
<b>Адреса викладання курсу</b>	вул. Кирила і Мефодія 8, 79005 Львів
<b>Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна</b>	фізичний факультет, кафедра фізики твердого тіла
<b>Галузь знань, шифр та назва спеціальності</b>	10 Природничі науки / 104 Фізика та астрономія
<b>Викладачі курсу</b>	доцент кафедри фізики твердого тіла, к.ф.-м.н Коваленко Марія Василівна
<b>Контактна інформація викладачів</b>	<a href="mailto:mariya.kovalenko@lnu.edu.ua">mariya.kovalenko@lnu.edu.ua</a> <a href="https://physics.lnu.edu.ua/employee/kovalenko-m-v">https://physics.lnu.edu.ua/employee/kovalenko-m-v</a>
<b>Консультації по курсу відбуваються</b>	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через електронну пошту та на платформі Microsoft Teams.
<b>Сторінка курсу</b>	<a href="https://physics.lnu.edu.ua/course/kompyuterni-metody-modelyuvannya-struktury-i-fizychnyh-vlastyvostej-fizyka">https://physics.lnu.edu.ua/course/kompyuterni-metody-modelyuvannya-struktury-i-fizychnyh-vlastyvostej-fizyka</a>
<b>Інформація про курс</b>	Курс 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.
<b>Коротка анотація курсу</b>	Дисципліна «Комп'ютерні методи моделювання структур та фізичних властивостей» є нормативною дисципліною зі спеціальності 104 Фізика та астрономія (експериментальна фізика) для другого (магістерського) рівня вищої освіти, яка викладається в 2 семестрі в обсязі 4,5 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). Зміст та матеріал навчальної дисципліни стосується аналізу сучасних розрахункових методів у галузі фізики твердого тіла, який орієнтує на актуальні питання та можливості моделювання структури та властивостей матеріалів, в рамках яких можлива подальша професійна та наукова кар'єра у галузі експериментальної фізики та фізики конденсованого стану.
<b>Мета та цілі курсу</b>	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.
<b>Література для вивчення дисципліни</b>	<b>Базова:</b> 1. В.В. Погосов, Ю.А. Куницький, А.В. Бабіч, А.В. Коротун, А.П. Шпак "Нанофізика і нанотехнології", Запоріжжя: ЗНТУ, 2011. - 380

	<p>с.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>2. А.П.Шпак, Ю.А.Куницький, О.О.Коротченков, С.Ю.Смик. Квантові низькорозмірні системи. К.: Академперіодика, 2003.- 310 с.</li> <li>3. <a href="#">Д.М.Заячук. Низькорозмірні структури і надгратки. НУ „Львівська політехніка”, 2006. – 220 с.</a></li> <li>4. <a href="#">R.Martin Electronic Structure. Basic theory and practical methods. – Cambrige – 2004. – 642 p.</a></li> <li>5. <a href="#">Computational materials science: an introduction / June Gunn Lee // Second edition.   Boca Raton : CRC Press, Taylor &amp; Francis, 2017. – 351 p.</a></li> <li>6. Стрижак П.Є. Квантова хімія : Підруч. для студ. ВНЗ. – К. : Вид. дім "Києво-Могилянська академія", 2009. – 458 с.</li> <li>7. K. Varga and J. A. Driscoll, “Computational Nanoscience, Applications for Molecules, Clusters, and Solids”, Cambridge University Press, Cambridge, 2011.</li> <li>8. C. Massobrio, H. Bulou, Ch. Goyhenex (eds.), “Atomic-Scale Modeling of Nanosystems and Nanostructured Materials”, Lecture Notes in Physics 795, Springer, Berlin Heidelberg, 2010.</li> <li>9. <a href="#">D. Marx &amp; J. Hutter, “Ab initio molecular dynamics: basic theory and advanced methods”, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.</a></li> <li>10. <a href="#">Handbook of nanophysics. Principles and methods, V.1 / editor, Klaus D. Sattler. // Boca Raton : CRC Press, Taylor &amp; Francis, 2011. – 760 p.</a></li> </ol> <p><b>Допоміжна:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>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.</li> <li>2. Handbook of materials modeling (Vol. 1 and 2) / S. Yip (ed.), Springer. - 2965 p.</li> </ol> <p><b>Інформаційні ресурси:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. <a href="http://www.nanohub.org">www.nanohub.org</a></li> <li>2. <a href="https://www.samson-connect.net/">https://www.samson-connect.net/</a></li> <li>3. <a href="http://www.quantum-espresso.org">www.quantum-espresso.org</a></li> <li>4. <a href="http://www.skybox.net.ua">www.skybox.net.ua</a></li> <li>5. <a href="http://www.nbuu.gov.ua/portal/natural/nano/">www.nbuu.gov.ua/portal/natural/nano/</a></li> </ol>
<b>Тривалість курсу</b>	один семестр
<b>Обсяг курсу</b>	135 годин, з яких 32 годин аудиторних занять, з них 16 годин лекцій, 16 годин лабораторних занять, та 103 години самостійної роботи
<b>Очікувані результати навчання</b>	<p>В результаті вивчення цього курсу студент буде знати: теоретичні підходи та наближення, які використовують емпіричні, напівемпіричні та <i>ab initio</i> методи розрахунків; сучасні методики розрахунків та принципи моделювання.</p> <p>вміти: розраховувати основні характеристики просторової та електронної структури, а також динамічних властивостей створених моделей; обґрунтувати доцільність потрібних наближень під час дослідження структури та властивостей твердих тіл і наноструктур та володіти методами побудови моделей, що описують різні фізичні явища у твердих тілах і наноструктурах.</p>
<b>Ключові слова</b>	Метод функціоналу густини, метод Монте-Карло, оптимізація геометрії, електронний спектр, нанотрубки, нанострічки, нанокластери, дефекти.

<b>Формат курсу</b>	Очний /заочний
	проведення лекцій, лабораторних робіт та консультації для кращого розуміння тем
<b>Теми</b>	Наведено у табл.1 і табл. 2
<b>Підсумковий контроль, форма</b>	іспит в кінці семестру комбінований
<b>Пререквізити</b>	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.
<b>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу</b>	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>практичні</i> – виконання практичних 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.
<b>Необхідне обладнання</b>	персональний комп'ютер, операційні системи (Windows, Linux), спеціальне програмне забезпечення (Quantum ESPRESSO, Nanotube Modeler, LAMMPS), загальнозживані комп'ютерні програми, проектор
<b>Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)</b>	Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням: • практичні/самостійні тощо: 40% семестрової оцінки; максимальна кількість балів 40 • контрольні заміри (модулі): 10% семестрової оцінки; максимальна кількість балів 10 • іспит: 50% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів 50. Підсумкова максимальна кількість балів 100.
<b>Питання до екзамену</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. В чому суть квантова-механічного підходу розрахунків «із перших принципів» для моделювання структур?</li> <li>2. Які комп'ютерні пакети використовуються для проведення моделювання структури та фізичних властивостей? Переваги та недоліки.</li> <li>3. В чому головна суть теорії функціонала густини?</li> <li>4. З якою метою використовують метод молекулярної динаміки?</li> <li>5. З якою метою проводиться оптимізація структури?</li> <li>6. В чому складність розрахунків з перших принципів?</li> <li>7. Види псевдопотенціалів.</li> <li>8. Види обмінно-кореляційних потенціалів.</li> </ol>

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 щілину?
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

	<p>методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної взаємодії. Обмінно-кореляційні функціонали. Параметричні функціонали.</p> <p>38. Аналітичні та чисельні методи оптимізації геометрії (метод найшвидшого спуску, метод спряжених градієнтів.)</p> <p>39. Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля.</p> <p>40. Кластерні методи. <math>X\alpha</math> - метод. Кластерне наближення та його застосування.</p> <p>41. Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки.</p> <p>42. Моделювання Кара-Паріселло.</p> <p>43. Моделювання точкових дефектів. Електронна структура твердих тіл біля поверхні. Стани Тамма і Шоклі.</p> <p>44. Розрахунок електростатичної енергії іонного кристалу методом Евальда.</p> <p>45. Аналіз хімічного зв'язку. Аналіз заселеності по Маллікену і альтернативні схеми розподілу заряду.</p> <p>46. Аналіз хімічного зв'язку на основі розподілу електронної густини. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини.</p> <p>47. Спектр уявної частини діелектричної проникності за результатами зонного розрахунку.</p> <p>48. Аналіз Крамерса-Кроніга. Розрахунок оптичних спектрів.</p> <p>49. Атомні та пружні характеристики твердих тіл.</p> <p>50. Ab initio розрахунки фононних спектрів кристалів і надграток.</p> <p>51. Обчислення енергетичних характеристик і термодинамічних функцій, передбачення стійкості системи.</p> <p>52. Розрахунок деяких характеристик ІЧ, ЕПР, ЯМР, ЯГР –спектрів.</p> <p>53. Вплив зовнішніх полів (температура, тиск, магнітне поле) на зонно-енергетичну структуру твердих тіл.</p> <p>54. Розподіли густини станів вуглецевих нанотрубок</p> <p>55. Розрахунок параметрів екранування далекодіючого кулонівського вкладу в потенціал парної міжіонної взаємодії.</p>
<b>Опитування</b>	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

## Схема курсу «Комп'ютерні методи моделювання структур та фізичних властивостей»

Тиждень	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1,2	<p><b>Вступ</b> 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.</p> <p><b>Тема 1. Методи розрахунку одноелектронних станів квантових систем</b> Квантомеханічні моделі реальних об'єктів та основні методи розрахунків їх властивостей. Адіабатичне наближення. Теорема Блоха. Область нееквівалентних значень хвильового вектора. Зона Бриллюена. Граничні умови. <b>С.Р.</b> Вивчення матеріалу лекції. Фізичні механізми формування властивостей наноматеріалів.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 6 год	2 тижні
3,4	<p><b>Тема 2. Метод функціоналу густини</b> 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. <b>С.Р.</b> Вивчення матеріалу лекції. Основи методу функціоналу густини.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 8 год	2 тижні
5,6	<p><b>Тема 3. Напівемпіричні методи розрахунку</b> Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля. Метод сильного зв'язку. <b>С.Р.</b> Вивчення матеріалу лекції. Основи k-p методу.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 6 год	2 тижні
7,8	<p><b>Тема 4. Емпіричні методи розрахунку</b> Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки. Парні потенціали. Багаточастинкові потенціали. Моделювання Кара-Парінелло. Зв'язок розрахованих параметрів та експериментально вимірюваних характеристик. <b>С.Р.</b> Вивчення матеріалу лекції. Моделювання різних термодинамічних ансамблів в молекулярній динаміці</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 8 год	2 тижні
9,10	<p><b>Тема 5. Статистичні методи розрахунку</b> Метод Монте-Карло. Статистичні ансамблі. Кінетичне Монте-Карло моделювання. Міграція атомів по поверхні як процес випадкового блукання. Енергія</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 8 год	2 тижні

	активації і частота стрибків. Ймовірності елементарних подій. Основні алгоритми кінетичного Монте-Карло моделювання. С.Р. Вивчення матеріалу лекції. Алгоритм Метрополіса.		
11,12	<b>Тема 6. Аналіз результатів розрахунків властивостей наноструктур</b> 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	2 тижні
13,14	<b>Тема 7. Топологічне моделювання наноструктур</b> 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. С.Р. Вивчення матеріалу лекції. Визначення геометрії та граничних умов для структур різної розмірності.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 6 год	2 тижні
15, 16	<b>Тема 8. Розрахунок спектральних характеристик наноструктур</b> 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	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 поверхні металевої сполуки	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 еластичних констант напівпровідникових кристалів.	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год	2 тижні
13	Розрахунки 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