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 31 серпня 2026 р.)

Завідувач кафедри _____
проф. Володимир КАПУСТЯНИК

Силабус

з навчальної дисципліни “Квантова теорія твердого тіла”, що викладається в межах ОНП “Теоретична фізика та астрофізика” другого (магістерського) рівня вищої освіти для здобувачів зі спеціальності Е5 «Фізика та астрономія»

Львів 2026

Назва курсу	**Квантова теорія твердого тіла**
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	E Природничі науки, математика та статистика E5 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 онлайн-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/kvantova-teoriya-tverdoho-tila-104-op-teoretychna-fizyka-ta-astrofizyka
Інформація про курс	Дисципліна “Квантова теорія твердого тіла” є вибірковою дисципліною зі спеціальності E5 Фізика та астрономія для ОНП «Теоретична фізика та астрофізика» для другого (магістерського) рівня вищої освіти, яка викладається в 3-му семестрі в обсязі 3,0 кредити (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація курсу	Курс “Квантова теорія твердого тіла” розроблено таким чином, щоб надати учасникам відповідні теоретичні знання, уміння та навички для продукування нових ідей і розв’язання комплексних проблем у галузі фізики твердого тіла. Тому в курсі представлені відповідні теоретичні дані та передбачено розв’язання практичних задач, пов’язаних зі застосуванням квантово-механічних і класичних моделей твердих тіл для моделювання структурних, електронних та фізичних властивостей таких структур.
Мета та цілі курсу	Метою вивчення вибіркової дисципліни “Квантова теорія твердого тіла” 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 навичок 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. – Cambrige, 2nd Edition. – 2020. – 788 p. 3. Density Functional Theory: Modeling, Mathematical Analysis, Computational Methods, and Applications / E. Cancès, G. Friesecke (eds.) – Springer, 2023. – 580 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. Ohno K. Computational Materials Science - From Ab Initio to Monte Carlo Methods / K. Ohno, K. Esfarjani, Y. Kawazoe – Springer-Heidelberg, Berlin, 2018. – 427 p. 2. Handbook of materials modeling / editor S. Yip. – Springer, 2020. – 2965 p. 3. Sholl D.S. Density Functional Theory: A Practical Introduction / D. S. Sholl, J. A. Steckel – Wiley, 2nd Edition, 2022. – 224 p. 4. Хацевич О.М. Основи квантової хімії: навч. посіб. / О.М. Хацевич, С. А. Курта // ДВНЗ "Прикарпат. нац. ун-т ім. Василя Стефаника". – Івано-Франківськ: Прикарпат. нац. ун-т ім. Василя Стефаника, 2019. – 259 с. 5. Marx D. Ab initio molecular dynamics: basic theory and advanced methods / D. Marx & J. Hutter. – Cambridge University Press, Cambridge, 2009. – 567 p. 6. 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.nbuv.gov.ua/portal/natural/nano/
Тривалість курсу	один семестр
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	В результаті вивчення цього курсу студент буде **знати:** традиційні методи розрахунку зонної структури твердих тіл, а саме метод лінійної комбінації атомних орбіталей, метод суперкомірок, метод плоских, ортогоналізованих та повністю ортогоналізованих плоских хвиль тощо. **вміти:** оцінювати властивості електронного газу в основному стані, розраховувати його термодинамічні властивості; застосовувати метод лінійної комбінації атомних орбіталей до ідеальних кристалів; застосовувати метод псевдопотенціалу для опису електронної структури і властивостей твердих тіл; застосовувати відповідний метод розрахунку зонної структури у залежності від типу досліджуваного

	об’єкту; проводити процедуру екранування локальних та нелокальних модельних потенціалів; вибирати оптимальну модель, методи першопринципного розрахунку та псевдопотенціалів
Ключові слова	Метод функціоналу густини, метод псевдопотенціалу, ЛКАО, оптимізація геометрії, електронний спектр
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, 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 диференційних рівнянь, побудови та аналізу графічних залежностей.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Використовуються такі методи навчання: а) *словесні* – лекція, пояснення, бесіда, інструктаж (вступний та поточний) під час виконання лабораторних робіт; б) *наочні* – ілюстрування лекційного матеріалу презентаціями, що включають в себе таблиці, схеми та графіки; в) *лабораторні* – виконання лабораторних робіт, що передбачає організацію навчальної роботи для отримання нових знань, перевірки певних наукових гіпотез на рівні досліджень, узагальнень та аналізу, а також 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), загальновживані комп’ютерні програми, проектор
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням: • лабораторні: 80 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів 80 (лабораторні №1 і 6 по 10 балів, №2-5 по 15 балів); • контрольні роботи: 20 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів 20 (дві контрольні по 10 балів); Підсумкова максимальна кількість балів – 100. **Критерії оцінювання лабораторних робіт:** 5 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на високому рівні; 4 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на достатньо високому рівні; 3 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на задовільному рівні; 2 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 з теми цього курсу. Визнання та зарахування результатів такого навчання здійснюються відповідно до наданих документів про неформальне та/або інформальне навчання. Додаткові 10 балів можна отримати, наприклад пройшовши онлайн курс Introduction to Density Functional Theory DFT Calculation for Surfaces of Solids або подібний курс за тематикою курсу за умови, що загальне число набраних балів не перевищуватиме 100 балів Додаткові 10 балів студент також може отримати за публікацію статті або особисту участь у науковій конференції за тематикою курсу за умови, що загальна кількість набраних балів не перевищуватиме 100 балів. **Академічна доброчесність**: очікується, що роботи студентів будуть їхніми оригінальними дослідженнями чи міркуваннями. Списування, втручання в роботу інших студентів, відсутність посилань на використані джерела становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної недоброчесності. Виявлення ознак академічної недоброчесності 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

	всіх строків, визначених для виконання всіх 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 також до використання іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих. **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.
Питання до контрольних робіт	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… 20. Зонно-енергетична структура твердого тіла. 21. Які властивості кристалу можна розрахувати на основі зонно-енергетичної діаграми? 22. Методи розрахунку одноелектронних станів кристалу. Метод МО-ЛКАО. 23. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока. Локальне наближення для обмінного потенціалу. Типи базисних функцій і матричних елементів оператора Фока. 24. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона. Теорія Томаса-

	Фермі. 25. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини. 26. Метод псевдопотенціалу. Формалізм плоских хвиль. 27. Сучасні методи врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної взаємодії. Обмінно-кореляційні функціонали. Параметричні функціонали. 28. Аналітичні та чисельні методи оптимізації геометрії (метод найшвидшого спуску, метод спряжених градієнтів.) 29. Моделювання точкових дефектів. Електронна структура твердих тіл біля поверхні. 30. Аналіз хімічного зв'язку. Аналіз заселеності по Маллікену і альтернативні схеми розподілу заряду. 31. Аналіз хімічного зв'язку на основі розподілу електронної густини. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини. 32. Спектр уявної частини діелектричної проникності за результатами зонного розрахунку. 33. Аналіз Крамерса- Кроніга. Розрахунок оптичних спектрів. 34. Атомні та пружні характеристики твердих тіл. 35. Ab initio розрахунки фононних спектрів кристалів і надграток. 36. Обчислення енергетичних характеристик і термодинамічних функцій, передбачення стійкості системи. 37. Розрахунок деяких характеристик ІЧ, ЕПР, ЯМР, ЯГР –спектрів. 38. Вплив зовнішніх полів (температура, тиск, магнітне поле) на зонно-енергетичну структуру твердих тіл. 39. Розподіли густини станів вуглецевих нанотрубок 40. Розрахунок параметрів екранування далекодіючого кулонівського вкладу в потенціал парної міжіонної взаємодії.
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Таблиця 1

Схема курсу “**Квантова теорія твердого тіла**”

Тиждень	Тема	Форма діяльності та обсяг годин	Література	Термін виконання
1,2	**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. **Тема 1. Методи розрахунку одноелектронних станів квантових систем** Квантомеханічні моделі реальних об’єктів та основні методи розрахунку їхніх властивостей. Адіабатичне наближення. Теорема Блоха. Область нееквівалентних значень хвильового вектора. Зона Бриллюена. Граничні умови. **С.Р.** Вивчення матеріалу лекції. Фізичні механізми формування властивостей наноматеріалів.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	Базова: 1, 2, 6; Допоміжна: 1, 4	2 тижні
3,4	**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. **С.Р.** Вивчення матеріалу лекції. Основи методу функціоналу густини.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 4 год	Базова: 2, 3, 6; Допоміжна: 2, 3	2 тижні
5,6	**Тема 3. Обмінно-кореляційний функціонал: опис та наближення** Принцип Кона-Шема та наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини. **С.Р.** Вивчення матеріалу лекції. Основні наближення для обмінно-кореляційного функціоналу.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	Базова: 5, 6; Допоміжна: 3	2 тижні
7,8	**Тема 4. Метод псевдо¬потенціалу** Формалізм плоских хвиль. Сучасні методи врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної взаємодії. Нормозберігаючі та ультрам’які псевдопотенціали.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	Базова: 1, 2, 6; Допоміжна: 6	2 тижні

	С.Р. Вивчення матеріалу лекції. Опис псевдопотенціалів.			
9,10	**Тема 5. Емпіричні методи розрахунку** Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки. Парні потенціали. Багаточастинкові потенціали. Моделювання Кара-Парінелло. 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 – 4 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. Основні пакети програм для виконання обчислювальних задач у фізиці наноструктур. **С.Р.** Вивчення матеріалу лекції. Моделювання електронного спектру наноструктур різної геометрії.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 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 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 – 4 год	Базова: 1, 2, 6; Допоміжна: 2	2 тижні
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.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 4 год	Базова: 2, 4, 6;	2 тижні

Таблиця 2

Теми лабораторних занять

Тиждень	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1	Розрахунок параметрів ґратки на основі перших принципів на прикладі напівпровідникової сполуки.	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 2 год	2 тижні
3	Комп'ютерне моделювання зонно-енергетичної структури та густини станів кристалів	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
5	Розрахунки оптичних властивостей напівпровідникових сполук.	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
7, 9	Розрахунок з перших принципів констант пружності та інших механічних властивостей напівпровідникових кристалів.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 4 год	4 тижні
11, 13	Розрахунки з перших принципів фононних спектрів напівпровідникових сполук.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 4 год	4 тижні
15	Оптимізація геометрії вуглецевої нанотрубки.	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні