

ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені ІВАНА ФРАНКА

Фізичний факультет

Затверджено
на засіданні кафедри фізики твердого тіла
Протокол № 15 від 25.06. 2019 р.

Завідувач кафедри фізики твердого тіла

 / Капустяник В.Б. /

Силабус

МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ У ФІЗИЦІ НАНОСТРУКТУР

галузь знань	10 – Природничі науки
спеціальність	105 – Прикладна фізика та наноматеріали
спеціалізація	фізика напівпровідників і діелектриків
факультет	фізичний

Кредитно-модульна система
організації навчального процесу

2019 – 2020 навчальний рік

**Силабус курсу «МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ У ФІЗИЦІ НАНОСТРУКТУР»
2019–2020 н.р.**

Назва курсу	Методи моделювання у фізиці наноструктур
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 / 105 Прикладна фізика та наноматеріали
Викладачі курсу	доцент кафедри фізики твердого тіла, к.ф.-м.н Бовгира Олег Вікторович
Контактна інформація викладачів	oleh.bovhyra@lnu.edu.ua https://physics.lnu.edu.ua/employee/bovhyra-oleh-viktorovych
Консультації по курсу відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та практичних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через електронну пошту.
Сторінка курсу	https://physics.lnu.edu.ua/department/fizyky-tverdogo-tila
Інформація про курс	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 з застосуванням квантово-механічних і класичних моделей наноструктур для моделювання їхніх структурних, електронних та фізичних властивостей.
Коротка анотація курсу	Дисципліна «Методи моделювання у фізиці наноструктур» є вибірковою дисципліною з спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали для третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти, яка викладається в 4 семестрі в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). Зміст курсу: <ul style="list-style-type: none"> • Властивості електронного спектру нанорозмірних об'єктів. • Квантово-механічні і класичні моделі наноструктур. • Мікроскопічні і мезоскопічні методи моделювання (Монте-Карло і молекулярна динаміка, дисипативна динаміка часток, теоретико-польові методи, методи скінчених елементів). • Молекулярне конструювання. Комп'ютерна візуалізація нанооб'єктів. Можливості чисельного експерименту. • Програмні продукти для моделювання наносистем.
Мета та цілі курсу	Метою і завданням навчальної дисципліни «Методи моделювання у фізиці наноструктур» є формування необхідних теоретичних знань і практичних навиків використання комп'ютерних методів у моделюванні структури та прогнозуванні фізичних властивостей нанооб'єктів для оптимізації функціональних матеріалів на їх основі, що в подальшому стане цінним інструментом під час виконання дисертаційних робіт.
Література для вивчення дисципліни	Базова: 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"> 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. Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. - М.: Наука, 1995.-144 с. 5. Стрижак П.Є. Квантова хімія : Підруч. для студ. ВНЗ. – К. : Вид. дім "Києво-Могилянська академія", 2009. – 458 с. 6. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. — М. : Мир, 2001. — 520 с. 7. Vvedensky D.D. Multiscale modelling of nanostructures // J. Phys.: Condens. Matter. - 2004. - V.16. – P. R1537. 8. Рапапорт Денис К. Искусство молекулярной динамики. – М. ; Ижевск : Ин-т компьютер. исслед., 2012. – 630 с. 9. K. Varga and J. A. Driscoll, “Computational Nanoscience, Applications for Molecules, Clusters, and Solids”, Cambridge University Press, Cambridge, 2011. 10. C. Massobrio, H. Bulou, Ch. Goyhenex (eds.), “Atomic-Scale Modeling of Nanosystems and Nanostructured Materials”, Lecture Notes in Physics 795, Springer, Berlin Heidelberg, 2010. <p>Допоміжна:</p> <ol style="list-style-type: none"> 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. 4. Multiscale modeling in epitaxial growth / A. Voigt (ed.). – 2005. – Birkhäuser Verlag. - 237 p. 5. Handbook of materials modeling (Vol. 1 and 2) / S. Yip (ed.), Springer. - 2965 p. <p>Інформаційні ресурси:</p> <ol style="list-style-type: none"> 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	90 годин, з яких 48 годин аудиторних занять, з них 32 годин лекцій, 16 годин практичних занять, та 42 години самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>В результаті вивчення цього курсу аспірант буде знати: основні методи комп'ютерного моделювання фізичних властивостей нанооб'єктів; основні напрямки постановки і моделювання типових, оригінальних і проблемних фізичних задач і процесів.</p> <p>вміти: використовувати отримані знання на практиці при розв'язанні завдань теоретичного та прикладного характеру, а саме:</p>

	побудувати математичну модель фізичної задачі та процесу в інтегральному середовищі розробника програм та розрахувати необхідні дані, провести візуалізацію результатів розрахунків.
Ключові слова	Метод функціоналу густини, метод Монте-Карло, нанотрубки, нанострічки, нанокластери, оптимізація геометрії
Формат курсу	Очний /заочний
	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 комбінований
Пререквізити	Для вивчення курсу аспіранти 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.
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 таблицями, схемами та графіками; 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.
Необхідне обладнання	персональний комп'ютер, операційні системи (Windows, Linux), спеціальне програмне забезпечення (Quantum ESPRESSO, Nanotube Modeler, LAMMPS, SAMSON), загальнозживані комп'ютерні програми, проектор
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	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
Питання до екзамену	1. Методи розрахунку одноелектронних станів квантових систем. 2. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока. Локальне наближення для обмінного потенціалу. Типи базисних функцій і матричних елементів оператора Фока. 3. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона. Теорія Томаса-Фермі. 4. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до

	<p>наближення локальної густини.</p> <ol style="list-style-type: none"> 5. Метод псевдопотенціалу. Формалізм плоских хвиль. 6. Сучасні методи врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної взаємодії. Обмінно-кореляційні функціонали. Параметричні функціонали. 7. Аналітичні та чисельні методи оптимізації геометрії (метод найшвидшого спуску, метод спряжених градієнтів.) 8. Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля. 9. Кластерні методи. $X\alpha$ - метод. Кластерне наближення та його застосування. 10. Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки. 11. Моделювання Кара-Парінілло. 12. Моделювання точкових дефектів (вакансії, домішки). 13. Метод Монте-Карло. Статистичні ансамблі. Кінетичне Монте-Карло моделювання. 14. Чисельні розрахунки кінетики формування моношару. 15. Аналіз хімічного зв'язку. Аналіз заселеності за Маллікеном і альтернативні схеми розподілу заряду. 16. Аналіз хімічного зв'язку на основі розподілу електронної густини. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини. 17. Спектр уявної частини діелектричної проникності за результатами зонного розрахунку. Розрахунок оптичних спектрів. 18. Атомні та пружні характеристики наносистем. 19. Розподіли густини станів вуглецевих наноматеріалів. 20. Енергетичний спектр низькорозмірних систем в електричному і магнітному полях.
<p>Опитування</p>	<p>Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.</p>

Схема курсу «Методи моделювання у фізиці наноструктур»

Тиждень	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	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.</p>	Лекції – 4 год, самостійна робота – 1 год	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.</p>	Лекції – 4 год, самостійна робота – 1 год	2 тижні
5,6	<p>Тема 3. Напівемпіричні методи розрахунку Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля. Метод сильного зв'язку. Кластерні методи. Ха - метод. Кластерне наближення та його застосування.</p>	Лекції – 4 год, самостійна робота – 1 год	2 тижні
7,8	<p>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.</p>	Лекції – 4 год, самостійна робота – 1 год	2 тижні
9,10	<p>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.</p>	Лекції – 4 год, самостійна робота – 1 год	2 тижні
11,12	<p>Тема 6. Аналіз результатів розрахунків властивостей наноструктур Підходи до аналізу результатів розрахунків енергетичної структури квантових систем. Електронна</p>	Лекції – 4 год, самостійна робота – 1 год	2 тижні

	структура твердих тіл біля поверхні. Стани Тамма і Шоклі. Основні пакети програм для виконання вичислювальних задач у фізиці наноструктур.		
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.	Лекції – 4 год, самостійна робота – 1 год	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.	Лекції – 4 год, самостійна робота – 1 год	2 тижні

Таблиця 2

Теми практичних занять

Тиждень	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1	Моделювання процесу автоемісії з врахуванням шороховатості поверхні мікрокатода	практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
3	Неемпіричний розрахунок енергетичної будови молекули та інтерпретація його результатів.	практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
5	Моделювання процесів резонансного тунелювання в наноструктурах	практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
7	Моделювання властивостей напівпровідникових поверхонь з використанням модельних потенціалів.	практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
9	Алгоритми молекулярної динаміки.	практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
11	Моделювання процесів епітаксійного росту методом Монте Карло.	практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
13	Комп'ютерне моделювання структури наноматеріалів	практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
15	Комп'ютерне моделювання енергетичного спектра наноматеріалів	практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні