

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДВНЗ «ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА»**

Фізико-технічний факультет

Кафедра фізики і хімії твердого тіла

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Квантово-хімічні методи розрахунку енергетичного спектру

Освітня програма магістра

Спеціальність 104 Фізика та астрономія

Галузь знань 10 Природничі науки

Затверджено на засіданні кафедри
Протокол №3 від 19 жовтня 2020 р.

ЗМІСТ

1. Загальна інформація
2. Анотація до курсу
3. Мета та цілі курсу
4. Результати навчання (компетентності)
5. Організація навчання курсу
6. Система оцінювання курсу
7. Політика курсу
8. Рекомендована література

1. Загальна інформація					
Назва дисципліни	Квантово-хімічні методи розрахунку енергетичного спектру				
Викладач (-і)	Возняк Орест Михайлович				
Контактний телефон викладача	59-60-82				
E-mail викладача	Orest.voznyak@pnu.edu.ua				
Формат дисципліни	Очна				
Обсяг дисципліни	3 кредитів				
Посилання на сайт дистанційного навчання	http://www.d-learn.pu.if.ua/				
Консультації	Згідно з графіком консультацій				
2. Анотація до курсу					
Дисципліна «Квантово-хімічні методи розрахунку енергетичного спектру» є обов'язковою дисципліною і націлена на ознайомлення з розрахунками енергетичного спектру електронів у кристалах з різним типом симетрії ґраток; уміння складати комп'ютерні програми з розрахунку спектру та вміння користуватися науковою літературою					
3. Мета та цілі курсу					
Метою викладання навчальної дисципліни «Квантово-хімічні методи розрахунку енергетичного спектру» є вивчення студентами різних наближених методів знаходження одноелектронного зонного спектру та розвиток навиків наукової роботи з розрахунку енергетичного спектру електронів у кристалах з різним типом симетрії ґраток.					
4. Основні програмні результати					
Завдання: у результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен знати про:					
<ul style="list-style-type: none"> - загальну постановку задачі проблеми розвитку багатоелектронного рівняння Шредінґера; - квантово-механічний розрахунок електронного спектру твердих тіл, зокрема напівпровідних матеріалів, в наближенні слабого зв'язку; - зонний характер енергетичного спектру електронів в кристалах; - поняття зони Бріллюена, її високосиметричних точок; - метод лінійної комбінації атомних орбіталей та його застосування до різних сполук; - одно електронне наближення, метод само узгодження поля Хартрі-Фока із врахуванням спин-орбітальної взаємодії. 					
вміти :					
<ul style="list-style-type: none"> – використовувати отримані знання для розв'язання сучасних задач; – робити розрахунок енергетичного спектру електронів у кристалах з різним типом симетрії ґраток; – користуватися набутими знаннями при розгляді різноманітних практичних задач хімічної будови речовини для опису змін параметрів напівпровідникових матеріалів. – Складати комп'ютерні програми розрахунку спектру електронів у кристалах 					
3. Організація навчання курсу					
Обсяг курсу					
Вид заняття					Загальна кількість годин
лекції					14
семінарські заняття / практичні					20
лабораторні					-
самостійна робота (виконання індивідуальних завдань)					56
Ознаки курсу					
Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)		Нормативний / вибірковий	
3	104 Фізика та астрономія	2		Обов'язкові дисципліни	
Тематика курсу					
Тема, план	Форма заняття	Література	Завдання, год	Вага оцінки	Термін виконання
Тема 1. Проблема розвитку багато електронного	Лекція (2 год.)	Згідно списку	Опрацювати лекційні питання і	1-6 балів,	Згідно розкладу

рівняння Шредінгера. Наближений метод Бора-Опенгеймера.		літератури	питання самостійної (7 год.)		занять
Тема 2. Односпектроне наближення Хартрі-Фока.	Лекція (2 год.)	Згідно списку літератури	Опрацювати лекційні питання і питання самостійної (7 год.)	1-6 балів,	
Тема 3. Квантово-механічний розрахунок енергетичного спектру електронів наближені слабкого зв'язку (зони Бріллюена).	Лекція (2 год.)	Згідно списку літератури	Опрацювати лекційні питання і питання самостійної (7 год.)	1-6 балів,	Згідно розкладу занять
Тема 4. Метод сильного зв'язку для розрахунку енергетичного спектру напівпровідникових матеріалів	Лекція (1 год.) практ. (5 год.)	Згідно списку літератури	Опрацювати лекційні питання і питання самостійної (7 год.)	1-6 балів,	Згідно розкладу занять
Тема 5. Метод лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО)	Лекція (2 год.)	Згідно списку літератури	Опрацювати лекційні питання і питання самостійної (7 год.)	1-6 балів,	Згідно розкладу занять
Тема 6. Наближення слабкого зв'язку. Високо симетричні точки зони Бріллюена.	Лекція (1 год.) практ. (5 год.)	Згідно списку літератури	Опрацювати лекційні питання і питання самостійної (7 год.)	1-6 балів,	Згідно розкладу занять
Тема 7. Розрахунок енергетичного спектру для окремих високо симетричних точок зони Бріллюена сполук $A^{IV}B^{VI}$ методом ЖАО.	Лекція (2 год.) практ. (5 год.)	Згідно списку літератури	Опрацювати лекційні питання і питання самостійної (7 год.)	1-6 балів,	Згідно розкладу занять
Тема 8. Метод локалізованих функцій для розрахунку електронного енергетичного спектру ковалентних кристалів.	Лекція (2 год.) практ. (5 год.)	Згідно списку літератури	Опрацювати лекційні питання і питання самостійної (7 год.)	1-6 балів,	Згідно розкладу занять
6. Система оцінювання курсу					
Загальна система оцінювання курсу	Для перевірки знань, умінь і навичок студентів при вивченні навчальної дисципліни використовуються такі форми контролю: - поточний; - підсумковий (залік). Поточний контроль передбачає оцінювання усних відповідей студентів та результатів тестування. Підсумковий контроль здійснюється на основі накопичених балів протягом семестру в процесі поточного контролю.				
Вимоги до письмової роботи					
Семінарські заняття	-				
Умови допуску до підсумкового контролю	Студент допускається до підсумкового контролю за наявності контрольних робіт, а також результатів тестування по тематиці практичних занять.				

7. Політика курсу

Жодні форми порушень академічної доброчесності не толеруються.

У випадку таких подій – реагування відповідно до Положення 1 Положення та Кодексу честі.

8. Рекомендована література

Базова

1. Ашкрофт Н., Мермин Н. Теория твердого тела. -В 1-х т. М.: Мир, 1981.
2. Киттель Ч. Квантовая теория твердого тела. – М.:Мир,1967. -497 с.
3. Харрисон У. Теория твердого тела. -М.:Мир,1978. -616 с.
4. Ансельм А.М. Введение в теорию полупроводников. -М.:Мир,1965. -588 с.
5. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. М., Мир, 1981.-514 с.
6. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. Физика химической связи. Т 1,2. М., Мир, 1983.
7. Берсукер И.Б.Электронное строение и свойства координационных соединений. –Л.: Химия, 1976.-351 с.
8. Бацанов С.С., Звягина Р.А. Интегральные перекрытия и проблема эффективных зарядов. – Новосибирск:Наука,1966. Т.1.-386 с.
9. Товстюк К.Д. Полупроводниковое материаловедение.-К.: Наукова думка, 1984. -164 с
10. Electronic properties of cubic crystals with an average of five valence electrons per atom/ Н.М. Palatoglou, G. Theodororou, and N.A. Economou / - J/Pfys.Rev., V.N.1, p.1161171/

Викладач _____ Прокопів В.В.