

Державний вищий навчальний заклад
«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

проректор з навчальної роботи
С.В. Шарин

« » 2021 р.



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Електронна теорія твердого тіла

Освітньо-наукова програма 104 «Фізика та астрономія»

Освітній рівень третій (освітньо-науковий)

Спеціальність 104 «Фізика та астрономія»

Галузь знань 10 «Природничі науки»

Робоча програма «Електронна теорія твердого тіла» для аспірантів всіх спеціальностей. 12 с.

Розробник:

Никируй Л.І. – професор кафедри фізики і хімії твердого тіла

Робочу програму схвалено на засіданні фізики і хімії твердого тіла

Протокол від 26 серпня 2021 року № 1

Завідувач кафедри
фізики і хімії твердого тіла _____ Прокопів В.В.
(підпис)

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 6	Галузь знань 10 «Природничі науки»	Вибіркова	
	Спеціальність 104 «Фізика та астрономія»		
Змістових модулів – 2			
Кількість кредитів – 3	Освітня програма 104 «Фізика та астрономія»	Рік підготовки:	
Індивідуальне науково-дослідне завдання: –		2-й	
		Семестр	
Загальна кількість годин - 90		2-й	
		Лекції	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 4	Освітній рівень: третій (освітньо-науковий) PhD	14 год.	
		Практичні, семінарські	
		16 год.	__ год
		Лабораторні	
		__ год.	__ год.
		Самостійна робота	
		60 год.	
		Індивідуальні завдання: __ год.	
		Вид контролю: Залік	

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Зміст курсу передбачає аналіз сучасних проблем у теорії твердого тіла, який орієнтує на актуальні питання та можливості розрахунків електронних та енергетичних характеристик матеріалів, в рамках яких можлива подальша професійна та наукова кар'єра у галузі матеріалознавства. На даному курсі аспіранти поглиблюють теоретичні знання та навички щодо пояснення процесів, пов'язаних із розрахунками електронної структури, законів дисперсії для твердого тіла, засвоюють основи квантово-механічних підходів, розрахунків у рамках теорії функціоналу густини та роботах у відповідних програмних пакетах.

Мета курсу: ознайомити аспірантів з сучасним станом фізики твердого тіла, надати інформацію про сучасні методи теоретичних досліджень електрон-фононної взаємодії. Освітньою ціллю курсу є формування вміння у аспірантів проводити аналіз спектру властивостей твердого тіла на основі електронних та

фононних спектрів кристалів, класифікації спектрів квазічастинок та колективних збуджень, правил відбору, тощо.

Компетентності:

ІК Здатність розв'язувати складні комплексні спеціалізовані задачі та практичні проблеми дослідницько-інноваційної діяльності у галузі фізики, що передбачає застосування теорій та методів фізики, математики та інженерії, проведення експериментальних і теоретичних досліджень, здійснення інновацій з метою переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та практик.

ЗК02. Здатність ефективно спілкуватися державною та іноземними мовами із спеціальною та загальною аудиторіями.

ЗК05. Здатність до формування системного наукового світогляду, професійної етики та загального культурного кругозору.

ЗК07. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ФК04. Здатності здійснювати науково-педагогічну діяльність у вищій освіті.

ФК07. Здатності до самокритики, оцінювання та інтерпретації результатів експериментів та розрахунків.

Результати навчання:

ПРН02. Ясно та ефективно описувати інтенсивні, глибокі й деталізовані результати наукової роботи державною та іноземною мовами. Вести спеціалізовані наукові семінари та публікувати наукові статті з фізики та астрономії в провідних наукових журналах.

ПРН04. Створювати програмні продукти на різних мовах програмування відповідно до потреб дисертаційного дослідження, а також адаптувати, удосконалювати та вбудовувати програмні продукти, спочатку призначені для іншої мети.

ПРН08. Розуміти загальні принципи та методи природничих наук, а також методологію наукових досліджень, застосувати їх у власних фізичних дослідженнях та у викладацькій практиці.

ПРН11. Розв'язувати наукові та науково-прикладні проблеми фізики, технології та матеріалознавства з дотриманням норм академічної етики і врахуванням соціальних, економічних, екологічних та правових аспектів.

3. Програма навчальної дисципліни

Тема 1. Опис фізичних систем.

1. Наближення абсолютно твердого тіла.
2. Наближення суцільного середовища.
3. Наближення невзаємодіючих частинок.
4. Статистичний метод.

Тема 2. Система багатьох електронів.

1. Опис багатоелектронної системи з допомогою багаточастинкової хвильової функції та електронної густини.
2. Кінетична та потенціальна енергія електронів як функція електронної густини.

Тема 3. Енергія як функціонал електронної густини.

1. Енергія як функціонал електронної густини
2. Принцип Хюенберга-Кона. Теорія Томаса-Фермі.

Тема 4. Самоузгоджені рівняння Кона-Шема.

1. Невзаємодіючий електронний газ.
2. Система електронів, що взаємодіють між собою.

Тема 5. Розрахунок енергетичного спектру

1. Метод плоских хвиль (PW).
2. Метод приєднаних плоских хвиль (APW).

Тема 6. Метод псевдопотенціалу для знаходження потенціалу взаємодії електрона із атомами кристала.

1. Метод ортогоналізованих плоских хвиль (OPW).
2. Метод псевдопотенціалу.

Тема 7. Обмінно – кореляційні функції для DFT.

1. Проблема відшукування вигляду обмінно-кореляційних потенціалів.
2. Обмінно – кореляційні функції для DFT.

Тема 8. Програмні пакети для DFT.

1. Огляд програмних пакетів для розрахунків DFT та методів молекулярної динаміки.
2. Оптимізація структури.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усьог о	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	с.р.		л	п	лаб	інд	с.р.
1	2	3	4	5	6	7						
Тема 1. Опис фізичних систем	9	2	2			5						
Тема 2. Система багатьох електронів	9	2	2			5						
Тема 3. Енергія як функціонал електронної густини	14	2	2			10						
Тема 4. Самоузгоджені рівняння Кона-Шема	9	2	2			5						
Тема 5. Розрахунок енергетичного спектру	9	1	2			10						

Тема 6. Метод псевдопотенціалу для знаходження потенціалу взаємодії електрона із атомами кристала	16	1	2			5						
Тема 7. Обмінно – кореляційні функції для DFT	14	2	2			10						
Тема 8. Програмні пакети для DFT		2	2			10						
Усього годин	90	14	16			60						

5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Густина електронних станів	2
2	Програми обробки та візуалізації результатів. Інтерпретація результатів. Похибки	2
3	Метод плоских хвиль (PW). Метод приєднаних плоских хвиль (APW).	4
4	Метод ортогоналізованих плоских хвиль (OPW). Метод псевдопотенціалу	4
5	Обмінно-кореляційні потенціали для різних типів напівпровідникових структур	4
Разом		16

6. Теми лабораторних занять

Відповідно до робочої програми з дисципліни «Електронна теорія твердого тіла» лабораторні заняття не заплановані

7. Самостійна робота

Самостійна робота аспірантів – невід’ємна складова частина навчально-наукового процесу, яка відіграє важливу роль у процесі формування майбутнього спеціаліста.

Мета самостійної роботи – набуття навичок щодо вирішення конкретних практичних завдань і використання отриманих знань у подальшій практичній діяльності.

Самостійна робота при вивченні курсу складається з різних її видів:

- підготовка до аудиторних занять (лекцій, практичних занять);
- завершення розпочатих на практичних заняттях завдань, передбачених робочою програмою курсу;
- самостійне опрацювання окремих тем навчальної дисципліни згідно з навчально-тематичним планом.

Підготовка до лекційного заняття передбачає обов’язкове вивчення матеріалу попередньої лекції і ознайомлення з матеріалами наступної лекції (підручники, посібники).

Підготовка до практичних занять передбачає обов’язкове вивчення отриманого теоретичного матеріалу з метою подальшого застосування знань на практичних заняттях, у наступній практичній діяльності. При підготовці до заняття відповідної теми необхідно детально вивчити конспект лекції, підручник (навчальний посібник) та коротко законспектувати засвоєний матеріал. Практичні заняття передбачають вивчення теоретичного матеріалу та виконання завдань. Аспірант самостійно завершує у позааудиторних умовах розпочаті в аудиторіях завдання і здає у час, який встановлює викладач.

Виконувати завдання необхідно в такій послідовності:

- ознайомитись із завданням і вивчити його умову;
- визначити методи (прийоми) розв’язання кожної конкретної ситуації;
- безпосередньо почати розв’язувати завдання;
- обґрунтувати висновки і пропозиції згідно з отриманими результатами;

- виконане завдання належно оформити;
- захистити завдання (якщо це встановлено робочою програмою дисципліни) відповідно до встановленого графіка самостійної роботи.

Якщо передбачений програмою обсяг завдань аспірант не виконав і не захистив, то до іспиту його не допускають.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Одноелектронне наближення. Метод Хартрі-Фока.	5
2	Пост-Хартрі-Фоківські наближення. Метод функціоналу густини	5
3	Теорема Гогенберга-Кона. Теорема Кона-Шема.	10
4	Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки. Парні потенціали. Багаточастинкові потенціали.	5
5	Підходи до аналізу результатів розрахунків енергетичної структури квантових систем. Електронна структура твердих тіл біля поверхні.	5
6	Практичні аспекти DFT. Стратегії наближення невідомого обмінно-кореляційного потенціалу.	10
7	Концепція ширини забороненої зони. Практична схема розв'язання рівняння Кона-Шема за допомогою самоузгодженого наближення.	10
8	Молекулярне конструювання. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина	10
Разом		60

8. Індивідуальні завдання

Відповідно до робочої програми з дисципліни «Електронна теорія твердого тіла» індивідуальні завдання не заплановані.

9. Методи навчання

Словесні (навчальна лекція, пояснення, розповідь, бесіда, навчальна дискусія, диспут). Наочні (спостереження, демонстрування). Практичні (експериментальні навички). Проблемно-пошукові (розв'язання проблемних ситуацій і завдань, проблемне викладення). Методи за логікою руху змісту навчального матеріалу (індуктивні, дедуктивні).

За характером пізнавальної діяльності, при вивченні дисципліни «Електронна теорія твердого тіла» використовуються: пояснювально-наочний проблемний виклад; частково-пошуковий та дослідницький методи.

10. Методи контролю

Методами контролю з дисципліни «Електронна теорія твердого тіла» є поточний та підсумковий контроль.

Поточний контроль здійснюється під час проведення практичних занять і має на меті перевірку рівня підготовленості студента до виконання конкретної роботи. Формами проведення поточного контролю з дисципліни є:

- усні опитування на практичних заняттях;
- захисти підготовлених завдань (на лекційних та практичних заняттях);
- тестування тощо.

Підсумковий контроль проводиться з метою оцінки результатів навчання на освітньому рівні бакалавра. Підсумковий контроль з дисципліни «Електронна теорія твердого тіла» включає семестровий контроль у формі заліку.

Критерії оцінювання рівня знань на практичних заняттях, при виконанні самостійних та індивідуальних завдань:

5 балів – коли аспірант дає обґрунтовані, теоретично і практично правильні відповіді на запитання, рішення завдань правильні, демонструє знання навчально-методичної літератури, наводить узагальнення і висновки, був присутній на лекціях і практичних заняттях;

4 бали – коли аспірант знає викладений матеріал на «відмінно», але ним допущені незначні помилки у формулюванні термінів, категорій, розрахунків, коли за допомогою викладача швидко орієнтується і знаходить правильні відповіді. Присутність на лекціях і практичних заняттях обов'язкова;

3 бали – коли аспірант дає неправильну відповідь на одне запитання або на всі запитання дає малообґрунтовані, невичерпні відповіді, припускається грубих помилок у розрахунках і тільки за допомогою викладача може виправити допущені помилки;

2 бали – коли аспірант дає неправильні відповіді на 2-3 запитання, припускається грубих помилок у розрахунках і не може їх виправити, погано орієнтується в лекційному матеріалі;

1 бал – аспірант отримує за умови, якщо не зміг викласти зміст питання, погано орієнтується в матеріалі; відсутні логічна послідовність висловлювань та зміст відповіді; виконане завдання містить багато помилок, що заважають розумінню загального змісту;

0 балів – відповідь відсутня.

11. Оцінювання

Під час навчання студенти можуть отримати такі бали: Назва контролю	Мак кількість балів	Примітки
Практичні заняття	60	4 практичні тематичні роботи (робота в групах в аудиторії)
Залік	40	Мін оцінка допуску – 25 Мак оцінка допуску – 60
Разом:	100	Відмінно!

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, курсового проекту (роботи), практики	для заліку
90 – 100	A	відмінно	зараховано
80 – 89	B	добре	
70 – 79	C		
60 – 69	D	задовільно	
50 – 59	E		
26 – 49	FX	незадовільно з можливістю повторного	не зараховано з можливістю

		складання	повторного складання
0-25	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

12. Перелік питань, які виносяться на залік

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 використовують метод молекулярної динаміки?
5. З якою метою проводиться оптимізація структури?
6. В чому складність розрахунків з перших принципів?
7. Види псевдопотенціалів.
8. Види обмінно-кореляційних потенціалів.
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. Набір k-точок у DFT визначається по схемі...
21. Відповідно до теореми Блоха який параметр є квазі-періодичним?
22. Точка, яка знаходиться в центрі першої зони Бріллюена має назву?
23. Зонно-енергетична структура твердого тіла.
24. На зонно-енергетичній діаграмі напівпровідників і діелектриків проміжок над рівнем Фермі, в якому немає зон має назву?
25. Які властивості кристалу можна розрахувати на основі зонно-енергетичної діаграми?
26. Пошук рівноважних параметрів ґратки при яких енергія є мінімальною ґрунтується на рівнянні...
27. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока. Локальне наближення для обмінного потенціалу. Типи базисних функцій і матричних елементів оператора Фока.
28. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона. Теорія Томаса-Фермі.
29. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини.
30. Метод псевдопотенціалу. Формалізм плоских хвиль.
31. Сучасні методи врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної взаємодії. Обмінно-кореляційні функціонали. Параметричні функціонали.
32. Аналітичні та чисельні методи оптимізації геометрії (метод найшвидшого спуску, метод спряжених градієнтів.)
33. Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля.
34. Кластерні методи. Ха - метод. Кластерне наближення та його застосування.

12. Рекомендована література

1. С. В. Шулепов. Вопросы физики твердого тела. Вып. 5 .-Челябинск,1974 .-124 с.
2. Г. С. Жданов. Физика твердого тела. Электронные свойства твердых тел. М.:Наука,1972 .-168 с.
3. Коломиец В. М. Приближение локальной плотности в атомной и ядерной физике, К.:Наукова думка,1990 .-164 с.
4. Вонсовский С.В., Кацнельсон М.И. Квантовая физика твердого тела, М.:Наука,1983-336 с.
5. Стрижак Петро Євгенович, Квантова хімія: підручник, К.:ВД "Києво-Могилянська академія",2009 .-458 с.
6. Юхновський І. Р. Основи квантової механіки навч. Посібник, 2-ге вид., перероб. і доп. К.:Либідь,2002 .-392 с.
7. Кулаков А. В., Орленко Е. В., Румянцев А. А. Квантовые обменные силы в конденсированных средах, М.:Наука,1990 .-120 с.
8. Д.М.Заячук. Нанотехнології і наноструктури. Львів:"Львівська політехніка",2009 .-580 с.
9. Computational materials science: an introduction / June Gunn Lee // Second edition. | Boca Raton : CRC Press, Taylor & Francis, 2017. – 351 p.
10. Киттель Ч., Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
11. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Квантовая механика: Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974.
12. Є.С. Крячко, Є.Ю. Ремета, Теорія функціонала густини в атомній фізиці, УФЖ, Огляди. 2014. Т. 9, № 1.
13. Szabo, A.; Ostlund, N. S. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. McGraw-Hill: New York, 1989
14. Dronskowski, R. Computational Chemistry of Solid State Materials. Wiley-VCH Verlag: Weinheim, 2005.
15. Parr, R. G.; Yang, W. Annu. Rev. Phys. Chem. 1995, 46, 701.
16. Hartree, D. R. Proc. Cambr. Philos. Soc. 1929, 24, 111.
17. Stewart, J. J. P. In Semiempirical Molecular Orbital Methods, John Wiley & Sons: New York, 2007; pp 45–81.
18. Kohn, W.; Sham, L. J. Phys. Rev. 1965, 140, A1133.
19. Perdew, J. P.; Wang, Y. Phys. Rev. B 1986, 33, 8800.
20. Becke, A. D. Phys. Rev. A 1988, 38, 3098.
21. Perdew, J. P. Phys. Rev. B 1986, 33, 8822.
22. Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G. Phys. Rev. B 1988, 37, 785.
23. Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. Phys. Rev. Lett. 1996, 77, 3865.
24. Wigner, E.; Seitz, F. Phys. Rev. 1933, 43, 804
25. Deringer, V. L.; Tchougre'eff, A. L.; Dronskowski, R. J. Phys. Chem. A 2011, 115, 5461.
26. Lichtenstein, A. I.; Katsnelson, M. I. Phys. Rev. B 1998, 57, 6884.
27. Janssen, C. L.; Nielsen, I. M. B. Parallel Computing in Quantum Chemistry. CRC Press/Taylor & Francis Group: Boca Raton/London/New York, 2008.
28. Deringer, V. L., Dronskowski, R., & Wuttig, M. (2015). Microscopic Complexity in Phase-Change Materials and its Role for Applications. Advanced Functional Materials, 25(40), 6343-6359.
29. Deringer, V. L., & Dronskowski, R. (2013). Computational methods for Solids. Comprehensive Inorganic Chemistry II (Second Edition), Volume 9, 2013, Pages 59-87.
30. General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS) - User Guide.
31. Wien 2k – User Guide.
32. Xcrysden – User Guide.
33. Quantum Espresso – User Guide