

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНИКА



Фізико-технічний факультет

Кафедра фізики і хімії твердого тіла

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
МЕТОДИ РОЗРАХУНКІВ З ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ У ТЕОРІЇ
ТВЕРДОГО ТІЛА

Рівень вищої освіти – **третій (освітньо-науковий)**

Освітня програма **Фізика та астрономія**

Спеціальність **104 Фізика та астрономія**

Галузь знань **10 Природничі науки**

Затверджено на засіданні кафедри
фізики і хімії твердого тіла

Протокол № 1
від 29 серпня 2023 р.

м. Івано-Франківськ – 2023

1. Загальна інформація	
Назва дисципліни	Методи розрахунків з перших принципів у теорії твердого тіла
Викладач (-і)	Никируй Любомир Іванович
Контактний телефон викладача	59-60-82
Е-mail викладача	lyubomyr.nykyruy@pnu.edu.ua
Формат дисципліни	Очний
Обсяг дисципліни	3 кредити ЄКТС, 90 год.
Посилання на сайт дистанційного навчання	https://d-learn.pnu.edu.ua/course/subscription/through/url/c18a754e92540792d0d2
Консультації	Згідно з графіком консультацій
2. Анотація до навчальної дисципліни	
<p>Дисципліна «Методи розрахунків з перших принципів у теорії твердого тіла» є дисципліною за вибором для спеціальності 104 Фізика та астрономія для третього (доктор філософії) освітньо-наукового рівня вищої освіти, яка викладається в 3 семестрі в обсязі 3 кредити (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). Зміст та матеріал навчальної дисципліни стосується аналізу сучасних проблем у розрахункових методах у галузі фізики, який орієнтує на актуальні питання та можливості моделювання структури та властивостей матеріалів, в рамках яких можлива подальша професійна та наукова кар'єра у галузі фізики та астрономії. На даному курсі аспіранти поглиблюють теоретичні знання теоретичних основ, а також практичні навички застосування методів звичайного і залежного від часу функціоналу електронної густини для розрахунків електронної структури і динамічних властивостей матеріалів, засвоюють основи роботи у прикладних програмних пакетах SCM (ADF), GAMESS US, Wien 2k, Burai та програмах обробки / аналізу розрахованих значень (Avogadro, Chemcraft, GaussSum, Molden, Xcrysden, тощо).</p> <p>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, диференціальних рівнянь, методів математичної фізики, загальної фізики, квантової механіки, статистичної фізики, фізики твердого тіла та комп'ютерних технологій для розв'язку практичних завдань; володіти</p>	

навичками пошуку та опрацювання спеціалізованої літератури, розв'язку алгебраїчних і диференціальних рівнянь, побудови та аналізу графічних залежностей.

3. Мета та цілі навчальної дисципліни

Мета курсу: опанувати теоретичні основи та виробити практичні навички щодо виконання комп'ютерних розрахунків електронної структури твердих тіл. Практичне застосування методів в рамках функціоналу густини дозволить моделювати електронні процеси на одно- та багатопроцесорних комп'ютерах, візуалізувати та інтерпретувати отримані результати для наступного використання у сучасній фізиці.

Завдання курсу:

- застосування чисельних методів для розв'язання задач науково-дослідницького та технологічного спрямування;
- розвивати вміння застосовувати знання та набуті навички для розв'язання якісних та кількісних задач;
- набуття обчислювальних навичок;
- знайомство з математичним апаратом теорії функціонала електронної густини та доведення основних теорем;
- оволодіння базовими методами квантової хімії для опису структурних та термодинамічних характеристик матеріалів;
- отримання практичних навиків роботи із сучасними програмними пакетами, на базі яких реалізовано розрахунки властивостей матеріалів методом функціоналу електронної густини;
- аргументоване обґрунтування методу розв'язання поставленої задачі, наведення власних прикладів, формулювання висновків;
- здатність оцінювати точність і достовірність отриманих результатів та інтерпретувати результати комп'ютерного аналізу;
- самостійно проводити комп'ютеризовані дослідження та застосовувати дослідницькі навички для аналізу фізичних процесів в прикладних системах та матеріалах.
- екскурс в історію виникнення і розвитку теорії функціонала електронної густини.

4. Організація навчання

Обсяг навчальної
дисципліни

Вид заняття	Загальна кількість годин
лекції	16

семінарські заняття / практичні / лабораторні		14		
самостійна робота		60		
Ознаки навчальної дисципліни				
Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний /вибірковий	
1	104 Фізика та астрономія	2	вибірковий	
Тематика навчальної дисципліни				
Тема		кількість год.		
		лекції	заняття	сам. роб.
Тема 1. Ознайомлення із базовими принципами квантової механіки та квантової хімії. Метод функціоналу густини. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока.		2	2	5
Тема 2. Теорема Блоха. k -вектори та обернений простір. Зонні структури: 1D, 2D та 3D.		2		5
Тема 3. Теорія Томаса-Фермі.		2	2	5
Тема 4. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини.		2	2	5
Тема 5. Метод псевдопотенціалу		2	2	10
Тема 6. Обмінно-кореляційний потенціал (вихід за рамки методу самоузгодженого поля). Обмінно – кореляційні функції для DFT		2	2	10
Тема 7. Огляд програмних пакетів для розрахунків DFT та методів молекулярної динаміки. Оптимізація структури		2	2	10
Тема 8. Густина станів: інтерпретація результатів. Хімічні зв'язки. Фононний спектр. Сильно корельовані структури. Моделювання спектральних характеристик у фізиці та астрофізиці.		2	2	10
ЗАГ.:		16	14	60

5. Система оцінювання навчальної дисципліни

Загальна система оцінювання навчальної дисципліни

100 бальна:

60 балів підсумовуються за виконанні практичні завдання:

- Завдання: «Побудова розрахункового кластеру та оптимізація структури пропонованої системи» - **10 балів**.
- Завдання: «Застосування наближень локальної електронної густини (LDA) та узагальненого градієнтного наближення (GGA) для аналізу електронних станів» - **20 балів**.
- Завдання «Обмінно-кореляційні потенціали для різних типів напівпровідникових структур» - **20 балів**.
- Завдання «Моделювання поведінки структурних та термодинамічних характеристик реальних кристалічних структур» - **10 балів**.

На **40 балів** – оцінюється аналіз літератури та доповідь на занятті щодо підбору обмінно-кореляційних потенціалів матеріалів за темою дисертаційного дослідження.

Деякі теми можуть поєднуватися (замінятися) із тестами у системі дистанційного навчання. Кількість балів за тести еквівалентна кількості балів за практичну роботу.

Оцінка «зараховано» відповідає 50-100 балів; оцінка «не зараховано» відповідає 1-49 балам.

Зараховано-“відмінно” – студент демонструє повні і глибокі знання навчального матеріалу, достовірний рівень розвитку умінь та навичок, правильне й обґрунтоване формулювання практичних висновків, наводить повний обґрунтований розв’язок прикладів та задач, аналізує причинно-наслідкові зв’язки; вільно володіє науковими термінами;

Зараховано-“добре” – студент демонструє повні знання навчального матеріалу, але допускає незначні пропуски фактичного матеріалу, вміє застосувати його до розв’язання конкретних прикладів та задач, у деяких випадках нечітко формулює загалом правильні відповіді, допускає окремі несуттєві помилки та неточності розв’язках;

Зараховано-“задовільно” – студент володіє більшою частиною фактичного матеріалу, але викладає його не досить послідовно і логічно, допускає істотні пропуски у відповіді, не завжди вміє правильно застосувати набуті знання до розв’язання конкретних прикладів та задач, нечітко, а інколи й невірно формулює основні твердження та причинно-наслідкові зв’язки;

Незараховано – студент не володіє достатнім рівнем

	необхідних знань, умінь, навичок, науковими термінами
Вимоги до письмових робіт	Практичне заняття проводиться з метою формування у студентів умінь і навичок з предмету, вирішення сформульованих завдань, їх перевірка та оцінювання.. За метою і структурою практичні заняття є ланцюжком, який пов'язує теоретичне навчання і навчальну практику з дисципліни, а також передбачає попередній контроль знань студентів. Оцінка за практичне заняття враховується при виставленні підсумкової оцінки з дисципліни
Семінарські заняття	–
Умови допуску до підсумкового контролю	Студент допускається до підсумкового контролю за наявності результатів тестування по тематиці практичних занять, оцінювання роботи студента під час практичних занять, доповідь, реферат.
Підсумковий контроль	Форма контролю: залік; Форма здачі: комбінована

6. Політика навчальної дисципліни

Академічна доброчесність	<p>Дотримання академічної доброчесності засновується на ряді положень та принципів академічної доброчесності, що регламентують діяльність здобувачів вищої освіти та викладачів університету:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Кодекс честі Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника. • Положення про Комісію з питань етики та академічної доброчесності Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника. • Положення про запобігання академічному плагіату та інших видів академічної нечесності у навчальній та науково-дослідній роботі здобувачів освіти Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника . • Положення про запобігання академічному плагіату у Прикарпатському національному університеті імені Василя Стефаника. • Склад комісії з питань етики та академічної доброчесності у Прикарпатському національному університеті імені Василя Стефаника.
--------------------------	---

	<ul style="list-style-type: none"> Лист МОН України «До питання уникнення проблем і помилок у практиках забезпечення академічної доброчесності». <p>Ознайомитися з даними положеннями та документами можна за посиланням: https://pnu.edu.ua/положення-про-запобігання-плагіату/</p>
Пропуски занять (відпрацювання)	<p>Можливість і порядок відпрацювання пропущених здобувачем освіти занять регламентується «Положення про порядок організації та проведення оцінювання успішності здобувачів освіти ДВНЗ «Прикарпатського національного університету ім. Василя Стефаника» (введено в дію наказом ректора №799 від 26.11.2019)» (див. ст. 4).</p> <p>Ознайомитися з положенням можна за посиланням: https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</p>
Виконання завдання пізніше встановленого терміну	<p>У разі виконання завдання здобувачем освіти пізніше встановленого терміну, без попереднього узгодження ситуації з викладачем, оцінка за завдання – «незадовільно», відповідно до «Положення про порядок організації та проведення оцінювання успішності студентів ДВНЗ «Прикарпатського національного університету ім. Василя Стефаника» (введено в дію наказом ректора №799 від 26.11.2019)» (див. ст. 4-5).</p> <p>Ознайомитися із положенням можна за посиланням: https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</p>
Невідповідна поведінка під час заняття	<p>Невідповідна поведінка під час заняття регламентується рядом положень про академічну доброчесність (див. вище) та може призвести до відрахування здобувача вищої освіти (студента) «за порушення навчальної дисципліни і правил внутрішнього розпорядку вищого закладу освіти», відповідно до п.14 «Відрахування студентів» «Положення про порядок переведення, відрахування та поновлення студентів вищих закладів освіти».</p> <p>Ознайомитися із положенням можна за посиланням: https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</p>
Додаткові бали	<p>Додаткові бали до поточного контролю здобувач освіти може отримати, пройшовши навчальний курс у</p>

	<p>вигляді неформальної освіти з отриманням сертифікату в межах предмету вивчення дисципліни протягом навчального семестру, взявши участь у науковому, освітньому чи прикладному проєкті, який відповідає предмету дисципліни:</p> <p><i>2 бали</i> – нараховується здобувачам освіти, які пройшли навчальний курс у вигляді неформальної освіти з отриманням сертифікату в межах предмету вивчення дисципліни протягом навчального семестру.</p> <p><i>2 бали</i> – нараховується здобувачам освіти, які взяли участь у науковому, освітньому чи прикладному проєкті, який відповідає предмету дисципліни.</p> <p><i>1 бал</i> – нараховується здобувачам освіти, які підготували дайджест на певну тематику в межах вивчення дисципліни.</p> <p>Додаткові бали присуджуються у рамках «Положення про порядок організації та проведення оцінювання успішності студентів ДВНЗ «Прикарпатського національного університету ім. Василя Стефаника» (введено в дію наказом ректора №799 від 26.11.2019) (див. ст. 4).</p> <p>Ознайомитися із положенням можна за посиланням: https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</p>
Неформальна освіта	<p>Можливість зарахування результатів неформальної освіти регламентується «Положенням про порядок зарахування результатів неформальної освіти у ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника» (введено в дію наказом ректора №819 від 29.11.2019) Ознайомитися із положенням можна за посиланням: https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/</p>
7. Рекомендована література	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Hoffmann, R. (2021). Solids and surfaces: a chemist's view of bonding in extended structures. John Wiley & Sons. 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. Т.С. Крохмільський. Вступ до квантових обчислень. Навчальний посібник. Львів: ЛНУ ім. Івана Франка, 2018, 204 с. 5. Юхновський, І. Р. (2002). Основи квантової механіки: Навч. пос. для студ. фізичн. спец. 	

- вищ. навч. закл. К.: Либідь, 390.
6. R.Martin Electronic Structure. Basic theory and practical methods. – Cambridge – 2004. – 642 p.
 7. Computational materials science: an introduction / June Gunn Lee // Second edition. | Boca Raton : CRC Press, Taylor & Francis, 2017. – 351 p.
 8. Стрижак П.Є. Квантова хімія : Підруч. для студ. ВНЗ. – К. : Вид. дім "Києво-Могилянська академія", 2009. – 458 с.
 9. Слєта Л. О., Іванов В. В. Квантова хімія / Худож.-оформлювач Л.Д. Киркач-Осіпова. — Харків: Гімназія, 2008. — 443 с.
 10. Deringer, V. L., & Dronskowski, R. (2013). Computational methods for Solids. Comprehensive Inorganic Chemistry II (Second Edition), Volume 9, 2013, Pages 59-87.
 11. Веб-ресурс: Amsterdam Modeling Suite teaching materials: <https://www.scm.com/support/background/amsterdam-modeling-suite-teaching-materials/>
 12. General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS) - User Guide.
 13. Wien 2k – User Guide.
 14. Xcrysden – User Guide.
 15. Quantum Espresso – User Guide.
 16. Веб ресурс: <https://avogadro.cc/docs/tools/bond-centric-manipulate-tool/>

Викладач _____ Никируй Л.І.