

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Фізичний факультет

Кафедра фізики металів

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи

«___» _____ 2019 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ¹
Спеціальні методи програмування та моделювання у фізиці наносистем
для студентів

галузь знань 10 Природничі науки
(шифр і назва)

спеціальність 104 Фізика та астрономія
(шифр і назва спеціальності)

освітній рівень магістр
(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)

освітня програма Фізика
(назва освітньої програми)

спеціалізація Фізика наносистем
(за наявності) (назва спеціалізації)

вид дисципліни вибіркова

Форма навчання	<u>очна</u>
Навчальний рік	<u>2019/2020</u>
Семестр	<u>2</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>іспит</u>

Викладачі: доцент Плющай Інна Вячеславівна

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__»__ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__»__ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__»__ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2019

¹ Робоча програма навчальної дисципліни є нормативним документом вищого навчального закладу і містить виклад конкретного змісту навчальної дисципліни, послідовність, організаційні форми її вивчення та їх обсяг, визначає форми та засоби поточного і підсумкового контролю.

Розробники²: Плющай Інна Вячеславівна кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
доцент кафедри фізики металів
Козаченко Віктор Васильович кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
доцент кафедри загальної фізики

(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри _____

(підпис)

(Боровий М.О.)
(прізвище та ініціали)

Протокол № 10 від 7 травня 2019 р.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

протокол №21 від 10 травня 2019 року

Голова науково-методичної комісії _____
(підпис)

(Оліх О.Я.)
(прізвище та ініціали)

« _____ » _____ 2019 року

² Розробляється лектором. Робоча програма навчальної дисципліни розглядається на засіданні кафедри (циклової комісії – для коледжів), науково-методичної комісії факультету/інституту (радї навчального закладу - коледжу), підписується завідувачем кафедри (головою циклової комісії), головою науково-методичної комісії факультету/інституту (головою ради) і затверджується заступником декана/директора інституту з навчальної роботи (заступником директора коледжу).

ВСТУП

1. Мета дисципліни – отримання студентами теоретичних основ сучасних методів розрахунку електронної структури матеріалів та ознайомлення студентів з відповідними сучасними програмними пакетами; опанування деяких комп'ютерних моделей, що застосовуються при розв'язку багаточастинкових задач; підготувати студентів до проведення самостійних розрахункових досліджень в галузі фізики твердого тіла.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основи математичного аналізу, математичного моделювання, комп'ютерної фізики та програмних пакетів, квантової механіки, а також спеціального курсу «Квантова теорія твердого тіла».
2. Вміти застосовувати попередні знання з курсів математичного аналізу, математичного моделювання, комп'ютерної фізики та програмних пакетів, квантової механіки, а також спеціального курсу «Квантова теорія твердого тіла».
3. Володіти елементарними навичками математичних перетворень, побудови алгоритмів, програмування, опису квантових систем.

3. Анотація навчальної дисципліни / референс:

В рамках курсу «Спеціальні методи програмування та моделювання у фізиці наносистем» вивчаються: кластерні методи розрахунку електронної та атомної структури матеріалів починаючи від молекули, кластера, нанокристала та закінчуючи реальними кристалами: метод розрахунку ЛКАО (лінійна комбінація атомних орбіталей) та його застосування для різного типу матеріалів; рівняння Хартрі-Фока та методи його чисельного розв'язку; сучасні методи розрахунку електронної структури матеріалів; ознайомлення з методом молекулярної динаміки та Монте-Карло; моделювання фазових переходів в магнітних діелектриках (модель Ізінга), моделювання локалізації електронів тощо; вивчення зв'язку конфігураційного інтегралу з корелятивними функціями різних порядків, зокрема, радіальною функцією розподілу (РФР); володіння методом інтегральних рівнянь для РФР і термодинамічною теорією збурень. Методи викладання: лекції, практичні заняття, консультації. Методи оцінювання: опитування в процесі лекції, контрольні роботи після основних розділів спецкурсу, звіт по практичній роботі, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи студентів, іспит. Підсумкова оцінка виставляється на основі проміжних оцінок (60%) та іспиту (40%).

4. Завдання (навчальні цілі) – оволодіння методами і принципами деяких спеціальних методів програмування та моделювання у фізиці конденсованого стану, які є необхідними для вільного ознайомлення з науковою літературою, використання сучасних програмних пакетів для розрахунку електронної та атомної структури матеріалів, при виконанні відповідних кваліфікаційних робіт та подальшої самостійної наукової роботи.

5. Результати навчання за дисципліною: (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)		Методи викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Знати перелік основних методів числового моделювання в фізиці твердого тіла; їх можливості та обмеження застосування – часова та просторова шкала; основні поняття електронної теорії твердого тіла: поверхня Фермі, самоузгоджене поле, теорема Блоха, квазіхвильовий вектор, зонна структура, густина електронних станів тощо; методи розрахунку електронної структури починаючи від наближення майже вільних та сильно зв'язаних електронів та закінчуючи сучасними методами електронних розрахунків; перелік відповідних сучасних програмних пакетів - GAUSSIAN , ABINIT, VASP, GAMESS та інші; основні положення Теорії Функціонала Густина; основи методу молекулярної динаміки та особливості його застосування до задач фізики твердого тіла;	Лекції Самостійна робота	Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, іспит	40

* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

	перелік емпіричних потенціалів, що використовуються при МД моделюванні та критерії їх вибору.;			
1.2	знати визначення систем з топологічним безладом і методами опису їх рівноважних властивостей; метод корелятивних функцій довільного порядку; бінарні корелятивні функції; їх обчислення; зв'язок термодинамічних функцій рідких і аморфних металів з радіальною функцією розподілу; основні положення термодинамічної теорії збурень і її застосування; числове моделювання процесу гомогенної кристалізації аморфних металів.	<i>Лекції Самостійна робота</i>	<i>Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, іспит</i>	40
2.1	Вміти: вільно володіти загально вживаними термінами теорії твердого тіла: зонна структура, поверхня Фермі, функціонал густини, обмінний інтеграл, псевдопотенціал, метод молекулярної динаміки, парний потенціал, багаточастинковий потенціал, термостат тощо; визначати, який метод розрахунку можна застосувати до конкретної наукової проблеми виходячи з її просторової та часової розмірності. Знати, які відповідні програмні пакети існують для такого роду розрахунків. Знаходити у довідниковій літературі відповідні параметри, що необхідні для проведення моделювання властивостей твердих тіл, наприклад: кристалічні матричні елементи для проведення напівемпіричних розрахунків електронної структури чи параметри для парних чи багаточастинкових потенціалів для розрахунків методом молекулярної динаміки тощо.	<i>Лекції Самостійна робота Практичні роботи</i>	<i>Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит</i>	20

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін)

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни			
	1.1	1.2	2.1	2.2
Знати перелік основних методів числового моделювання в фізиці твердого тіла; їх можливості та обмеження застосування – часова та просторова шкала; основні поняття електронної теорії твердого тіла: поверхня Фермі, самоузгоджене поле, теорема Блоха, квазіхвильовий вектор, зонна структура, густина електронних станів тощо; методи розрахунку електронної структури починаючи від наближення майже вільних та сильно зв'язаних електронів та закінчуючи сучасними методами електронних розрахунків; перелік відповідних сучасних програмних пакетів - GAUSSIAN , ABINIT, VASP, GAMESS та інші; основні положення Теорії Функціонала Густини; основи методу молекулярної динаміки та особливості його застосування до задач фізики твердого тіла; перелік емпіричних потенціалів, що використовуються при МД моделюванні та критерії їх вибору.;	+			
знати визначення систем з топологічним безладом і методами опису їх рівноважних властивостей; метод корелятивних функцій довільного порядку; бінарні корелятивні функції; їх обчислення; зв'язок термодинамічних функцій рідких і аморфних металів з радіальною функцією розподілу; основні положення термодинамічної теорії збурень і її застосування; числове моделювання процесу гомогенної кристалізації аморфних металів.		+		
Вміти: вільно володіти загально вживаними термінами теорії твердого тіла: зонна структура, поверхня Фермі, функціонал густини, обмінний інтеграл, псевдопотенціал, метод молекулярної динаміки, парний потенціал, багаточастинковий потенціал, термостат тощо; визначати, який метод			+	

розрахунку можна застосувати до конкретної наукової проблеми виходячи з її просторової та часової розмірності. Знати, які відповідні програмні пакети існують для такого роду розрахунків. Знаходити у довідниковій літературі відповідні параметри, що необхідні для проведення моделювання властивостей твердих тіл, наприклад: кристалічні матричні елементи для проведення напівемпіричних розрахунків електронної структури чи параметри для парних чи багаточастинкових потенціалів для розрахунків методом молекулярної динаміки тощо.				
---	--	--	--	--

7. Структура курсу

Курс складається з 2-х змістовий модулів: «Сучасні методи розрахунку електронної та атомної структури матеріалів.» та «Автоматизація використання обчислювального та вимірювального лабораторного обладнання в LabView». Всього вивчається 11 тем.

8. Схема формування оцінки:

8.1 Форми оцінювання студентів: (зазначається перелік видів робіт та форм їх контролю / оцінювання із зазначенням Min. – рубіжної та Max. кількості балів чи відсотків)

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 (5 балів – 10 балів). Захист реферату 1 (5 балів – 10 балів). Виконання практичних робіт 1 (5 балів – 10 балів).
2. Модульна контрольна робота 2 (5 балів – 10 балів). Захист реферату 2 (5 балів – 10 балів). Виконання практичних робіт 2 (5 балів – 10 балів)

- підсумкове оцінювання у формі іспиту

Підсумкове оцінювання у формі екзамену³: (обов'язкове проведення екзаменаційного оцінювання в письмовій формі)

	ЗМ1/Частина 1 (за наявності)	ЗМ2/Частина 2 (за наявності)	Іспит	Підсумкова оцінка
Мінімум	<u>15</u>	<u>15</u>	<u>24</u>	<u>60</u>
Максимум	<u>30</u>	<u>30</u>	<u>40</u>	<u>100</u>

Студент не допускається до екзамену, якщо під час семестру набрав менше 30 балів.⁴

Оцінка за іспит не може бути меншою **24 балів** для отримання загальної позитивної оцінки за курс.

8.2 Організація оцінювання: (обов'язково зазначається порядок організації передбачених робочою навчальною програмою форм оцінювання із зазначенням, у тому числі, результатів навчання, опанування яких перевіряється конкретним оцінюванням).

Шкала відповідності

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно з можливістю повторного складання / Fail	35-59
Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни / Fail	0-34
Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

³ Семестрову кількість балів формують бали, отримані студентом у процесі теоретичного засвоєння матеріалу з усіх розділів дисципліни, семінарських занять, виконання практичних, лабораторних, індивідуальних, підсумкових контрольних робіт, творчих робіт впродовж семестру, передбачених робочою навчальною програмою (**100 балів** - для залікових дисциплін, у випадку, якщо дисципліна завершується екзаменом, то розподіл здійснюється за таким алгоритмом: **60 балів (60%) – семестровий контроль і 40 балів (40%) – екзамен**).

⁴ У випадку, коли дисципліна завершується екзаменом не менше – **20 балів**, а рекомендований мінімум **не менше 36 балів**, оскільки якщо студент на екзамені набрав менше **24 балів** (а це 60% від 40 балів, відведених на екзамен), то вони **не додаються** до семестрової оцінки незалежно від кількості балів, отриманих під час семестру, а в екзаменаційній відомості у графі «результуюча оцінка» переноситься лише кількість балів, отриманих під час семестру.

**СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ**

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	Самостійна робота
<i>Частина 1. Сучасні методи розрахунку електронної та атомної структури матеріалів.</i>				
1	<p>ТЕМА 1. Вступ. Перелік основних методів чисельного моделювання електронної структури. Їх можливості та обмеження застосування – часова та просторова шкала. Електронна структура системи. Основні визначення та наближення. Кристали, наночастинки та молекули. Зонні методи. Кластерні методи. Огляд методів чисельного моделювання електронної та атомної структури матеріалів, обмеження їх застосування – часова та просторова шкала.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекцій.</p> <p>Особливості реалізації теоретичних методів розрахунку електронної структури в сучасних програмних пакетах – міст між теорією та практикою.</p>	2		8
2	<p>ТЕМА 2. Електронні стани. Рівняння Хартри-Фока. (16 год.)</p> <p>Гамільтоніан кристалу. Адіабатичне наближення. Електронні стани. Багатоелектронна проблема. Наближення самоузгодженого поля. Рівняння Хартрі та рівняння Хартрі-Фока. Визначник Слетера.</p> <p>Рівняння Хартри-Фока. Базисні функції: плоскі хвилі, орбіталі Слетера, орбіталі Гауса, числові орбіталі. Рівняння Рутана. Алгоритм розрахунку. Квантові методи Монте-Карло.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекцій.</p> <p>Локалізований і делокалізований валентний зв'язок. Кореляція між електронною структурою атомів і атомною структурою.</p>	4	10	12
3	<p>ТЕМА 3. Сучасні методи розрахунку електронної структури твердих тіл (12 год.)</p> <p>Теоретичні основи сучасних методів розрахунку електронної структури матеріалів та відповідні сучасні програмні пакети. Особливості хвильової функції валентних електронів. Метод комірок. Метод приєднаних плоских хвиль.</p> <p>Метод ортогоналізованих плоских хвиль. Метод псевдопотенціалу. Властивості псевдопотенціалу. Модельний псевдопотенціал.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекцій.</p> <p>Електронні стани неідеального кристалу. Теорема Вань'є. Рівняння для хвильової функції електрона в полі домішки.</p>	4		8

4	<p>ТЕМА 4. Теорія Функціонала Густини (14 год.)</p> <p>Нобелівська лекція В.Кона 1999р. – «Електронна структура речовини – хвильові функції та функціонал густини». Хвильові функції для багатоелектронних систем. «Експоненціальна стінка». Теорія Функціонала Густини – основні положення та переваги.</p> <p>Теорія Томаса-Фермі. Теорія функціонала густини в формулюванні Хоенберга-Кона. Самоузгоджене рівняння Кона-Шема. Наближення для обмінного потенціалу: наближення локальної густини та загальне градієнтне наближення.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Гаміптоніан неупорядкованого сплаву. Функція Гріна. Домішкові рівні.</p>	2		8
5	<p>ТЕМА 5. Метод молекулярної динаміки та емпіричні потенціали. (12 год.)</p> <p>Класичний метод молекулярної динаміки. Рівняння руху. Алгоритм розрахунку.</p> <p>Парні потенціали (Ленарда-Джонса, Морзе, Бекінгема та інші), їх переваги та недоліки. Потенціал зануреного атома. Багаточастинкові потенціали. Потенціали для моделювання макромолекул.</p> <p>Загальна структура програми МД моделювання. Початкові умови. Граничні умови (періодичні). Похибки при інтегруванні. Схема Верле. Мікроканонічний та канонічний ансамблі. Вивід системи на рівновагу: термостати Берендсена, Гаусса, Нозе-Хувера, Ланжевена. Моделювання ізобаричних систем. Визначення температури, тиску та інших термодинамічних величин.</p> <p>Квантовий метод молекулярної динаміки. Наближення Бора-Опенгеймера та метод Кар-Парінелло.</p> <p>Огляд методів чисельного моделювання електронної та атомної структури твердих тіл, обмеження їх застосування – часова та просторова шкала. Демонстрація результатів чисельного моделювання в фізиці конденсованого стану.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>GAUSSIAN , ABINIT, VASP, GAMESS – умови розповсюдження та особливості реалізації.</p>	4	20	12
	<i>Підсумкова модульна контрольна робота 1</i>	1		
Частина 2. Автоматизація використання обчислювального та вимірювального лабораторного обладнання в LabView.				
6	<p>Тема 6. Вступ до LabView (14 год.)</p> <p>Програмне середовище LabView. Віртуальні прилади (ВП). Послідовність обробки даних. Організація програмного середовища LabView. Використання проектів в LabView. Вбудована допомога та керівництво користувача середовища LabView.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p>	2		12
7	<p>Тема 7. Створення віртуального приладу та підпрограм віртуального приладу. (14 год.)</p> <p>Компоненти віртуального приладу. Створення ВП. Типи і провідники даних. Редагування ВП. Відладка ВП. Підпрограми ВП. Створення іконки ВП та налаштування з'єднувальної панелі. Використання підпрограм ВП.</p>	2		12

	Перетворення експрес-ВП в підпрограму ВП. Перетворення виділеної секції блок-діаграми ВП в підпрограму ВП. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.			
8	Тема 8. Цикли та розгалуження (14 год.) Цикл While (за умовою). Цикл For (з фіксованим числом ітерацій). Організація доступу до значень попередніх ітерацій циклу. Функція Select. Структура Case. Використання вузів формули та математики. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.	2		12
9	Тема 9. Збір і відображення даних(14 год.) Виконання операцій аналогового вводу. Запис отриманих даних в файл. Виконання операцій аналогового виводу. Інформація про лічильники. Використання цифрових ліній вводу виводу. Графічне відображення даних. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.	2		12
10	Тема 10. Масиви та кластери. (14 год.) Створення масивів за допомогою циклу. Використання функцій роботи з масивами. Використання функцій роботи з кластерами. Кластери помилок. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.	2		12
11	Тема 11. Керування вимірювальними приладами (14 год.) GPIB- інтерфейс та його налаштування. Використання Instrument I/O Assistant. Архітектура програмного забезпечення віртуальних інтерфейсів (VISA). Драйвери вимірювальних приладів. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.	2		12
	Підсумкова модульна контрольна робота	1		
	ВСЬОГО	30	30	120

Примітка: слід зазначити теми, винесені на самостійне вивчення

Загальний обсяг 180 год.⁵, в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Семінари – **0 год.**

Практичні заняття – **30 год.**

Лабораторні заняття – **0 год.**

Тренінги – **0 год.**

Консультації - **0 год.**

Самостійна робота - **120 год.**

⁵ Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА⁶:

Основна: (Базова)

1. R.Martin Electronic Structure. Basic theory and practical methods. Cambridge 2004
2. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. Т.1,2. М.: Мир, 1983.
3. Ашкрофт А., Мермин Дж. Физика твердого тела. Т.1,2. М.: Мир, 1979,
4. Д.В. Хеерман. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990. 176 с.
5. Х. Гулд, Я.Тобочник Компьютерное моделирование в физике. Москва, Мир,1990, т.1-2
6. В.Кон Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности. – Успехи физ. наук, Том 172, №3.
7. Шпак А.П., Куницький Ю.А., Федоров В.С. Електронна структура та властивості твердих тіл. Київ 2004
8. http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_chemistry_computer_programs
9. Займан Дж. Модели беспорядка. М: Мир, 1982, 423 с.
10. Фишер И. З. Статистическая теория жидкостей. Серия: Современные проблемы физики. М.: Наука. 1961г. 280 с.
11. Grozin. Introduction to *Mathematica* for Physicists. Publisher: Springer, 2013, 197 p.
12. Дж. Кристиан. Теория превращений в металлах и сплавах. М.: Мир, 1978, 806 с.
13. LabVIEW для всех / Джеффри Тревис: Пер. с англ. Клушин Н. А. ~ М.: ДМК Пресс; ПриборКомплект, 2005. ~ 544 с.

Додаткова:

1. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М. Наука, 1978.
2. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: Наука , 1978.- 792 с.
3. Займан Дж. Принципы теории твердого тела, М.Мир, 1966.
4. Маделунг О. Теория твердого тела. М. Наука, 1980.
5. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М. Наука, 1967.
6. Физика твердого тела / Энциклопедический словарь под ред. В.Г.Барьяхтара. - Киев: Наукова думка, 1966. - 452 с.
7. http://www.ni.com/pdf/manuals/371780n_0114.pdf

⁶ В тому числі Інтернет ресурси