

Розробники²:

Боровий Микола Олександрович, доктор фіз.-мат. наук, професор,
зав. кафедри загальної фізики
(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри

(підпис)

(Боровий М.О.)

(прізвище та ініціали)

Протокол № 7 від 19 травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

протокол №11 від 10 червня 2022 року

Голова науково-методичної комісії

(підпис)

(Оліх О.Я.)

(прізвище та ініціали)

²Розробляється лектором. Робоча програма навчальної дисципліни розглядається на засіданні кафедри (циклової комісії – для коледжів), науково-методичної комісії факультету/інституту (раді 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 глибоких і систематичних знань з методів опису електронної структури систем з високим ступенем локалізації валентних електронів та систем з колективізованими електронами, а також вивчення зв'язку електронних станів валентних електронів з макроскопічними характеристиками об'єктів.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основні закони та поняття з курсів загальної фізики, квантової механіки та статистичної фізики, фізики конденсованого стану, дифракційних методів досліджень, кристалографії, курсів вищої математики,.
2. Вміти застосовувати набуті раніше знання з курсів загальної фізики, квантової механіки та статистичної фізики, фізики конденсованого стану, дифракційних методів досліджень, кристалографії для розв'язку практичних задач з курсу.
3. Володіти елементарними навичками пошуку та опрацювання спеціалізованої літератури, розв'язку алгебраїчних і диференціальних рівнянь, побудови та аналізу графічних залежностей.

3. Анотація навчальної дисципліни / референс:

Обов'язкова навчальна дисципліна “Електронна структура та властивості твердих тіл” є складовою циклу професійної підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня “бакалавр”. Зокрема, її фундаментальні закони та поняття широко використовуються в ряді важливих дисциплін, які є складовими таких розділів фізики, як фізичне матеріалознавство та теорія твердого тіла. Основна задача – ознайомлення студентів з загальною багаточастковою задачею опису електронної структури, ієрархією операцій переходу до одночастинкового наближення, аналізом електронної структури на базі оцінки інтегралів перекриття, методами лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО) і псевдопотенціалу. Курс включає розгляд багаточасткового рівняння Шрьодінгера, його редукцію до одночастинкової задачі шляхом послідовного застосування адіабатичного наближення, наближення Хартри-Фока і самоузгодженого потенціалу, оцінку інтегралів перекриття і вибір адекватного методу опису електронної структури об'єкта дослідження. Окреме місце в структурі курсу займає застосування теоретичних знань для виконання конкретних розрахунків модельних і реальних об'єктів. В результаті вивчення дисципліни студенти повинні знати методику запису рівняння Шрьодінгера для багаточасткових задач і техніку їх редукції до одночастинкових; мати чітке розуміння ролі інтегралів перекриття у виборі методу опису електронної структури об'єкту; методи ЛКАО і псевдопотенціалу.

4. Завдання (навчальні цілі) – оволодіння методами і принципами, вміннями і навичками, необхідними в майбутній практичній діяльності фахівця в галузі фізики конденсованого стану та фізичного/неметалічного матеріалознавства.

Згідно вимог Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 104 «Фізика та астрономія» дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних **компетентностей**:

Інтегральних:

Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики і характеризується складністю та невизначеністю умов.

Загальних:

ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК3. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК7. Навички здійснення безпечної діяльності.

Фахових:

ФК1. Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії.

ФК2. Здатність використовувати на практиці базові знання з математики як математичного апарату фізики і астрономії при вивченні та дослідженні фізичних та астрономічних явищ і процесів.

ФК7. Здатність використовувати базові знання з фізики та астрономії для розуміння будови та поведінки природних і штучних об'єктів, законів існування та еволюції Всесвіту.

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 методику запису рівняння Шрьодінгера для багаточасткових задач і техніку їх редукції до одночастинкових.	Лекції, лабораторні роботи, самостійна робота	Модульні контрольні роботи, захист лабораторних робіт, перевірка самостійної роботи, опитування в процесі лекції, залік.	20
1.2	Знати метод ЛКАО та метод псевдо потенціалу.	Лекції, лабораторні роботи, самостійна робота	Модульні контрольні роботи, захист лабораторних робіт, перевірка самостійної роботи, опитування в процесі лекції, залік.	20
2.1	Вміти застосовувати метод ЛКАО до простих молекул і ідеальних кристалів.	Лекції, лабораторні роботи, самостійна робота	Модульні контрольні роботи, захист лабораторних робіт,	30

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

			перевірка самостійної роботи, опитування в процесі лекції, залік.	
2.2	Вміти застосовувати метод псевдо- потенціалу для опису електронної структури і властивостей металів і сплавів.	Лекції, лабораторні роботи, самостійна робота	Модульні контрольні роботи, захист лабораторних робіт, перевірка самостійної роботи, опитування в процесі лекції, залік.	30

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

Результати навчання дисципліни				
Програмні результати навчання	1.1	1.2	2.1	2.2
ПРН1. Знати, розуміти та вміти застосовувати основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних 8 фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики та астрономії.	+	+		+
ПРН3. Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій.	+		+	+

Структура курсу

Курс складається з 2-х змістових модулів: 1.) «Багаточастинкове і одночастинкове рівняння Шрьодінгера», який включає в себе 5 лекцій та 1 лабораторну роботу (3 години); 2.) «Методи ЛКАО і псевдопотенціалу», який складається з 10 лекцій та 4 лабораторних робіт (11 годин).

7. Схема формування оцінки:

7.1. 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 (12 балів – 20 балів).
2. Модульна контрольна робота 2 (12 балів – 20 балів). Захист лабораторних робіт (12 балів – 20 балів).

- підсумкове оцінювання у формі заліку

Підсумкове оцінювання у формі екзамену¹: (обов'язкове проведення екзаменаційного оцінювання в письмовій формі)

	ЗМ1/Частина 1 (за наявності)	ЗМ2/Частина 2 (за наявності)	Екзамен	Підсумкова оцінка
Мінімум	<u>12</u>	<u>24</u>	<u>24</u>	<u>60</u>
Максимум	<u>20</u>	<u>40</u>	<u>40</u>	<u>100</u>

у випадку комплексного екзамену слід вказати питому вагу складових

Студент не допускається до екзамену, якщо під час семестру набрав менше 36 балів.

(слід чітко прописати умови, які висуваються викладачами даної дисципліни).

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

7.2. 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).

7.3. 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

¹Семестрову 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**).

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва лекції	Кількість годин		
		лекції	лаб	С/Р
Змістовий модуль 1.Багаточастинкове і одночастинкове рівняння Шрьодінгера				
	Тема 1 Адиабатичне наближення Електронний гамільтоніан			
1	Запис повного багаточастинкового гамільтоніану. Ядерна і електронна підсистеми.	2		2
2	Адиабатичне наближення. Комутатор адиабатичного і електронного гамільтоніанів.	2		2
3	Електронне багаточастинкове рівняння Шредінгера.	2		2
	Тема 2. РЕДУКЦІЯ БАГАТОЧАСТИНКОВОГО РІВНЯННЯ ШРЬОДІНГЕРА ДО ОДНОЧАСТИНКОВОГО			
4	Метод Хартрі, його недоліки. Метод Хартрі – Фока. Детермінант Фока.	2		3
5	Самоузгоджений потенціал. Пошук самоузгодженого потенціалу методом ітерацій. Проблема ортогональності, її розв’язання.	2	3	4
	Модульна контрольна робота 1			
Змістовий модуль 2 .Методи ЛКАО і псевдопотенціалу.				
	ТЕМА 3. ОСНОВИ І ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ЛКАО			
6	Інтеграли перекриття; класифікація об’єктів з величиною інтегралу перекриття. Розклад хвильової функції системи по атомарних хвильових функціях.	2		3
7	Пошук власних значень енергії і коефіцієнтів розкладу. Застосування методу ЛКАО до молекул з S – валентними електронами.	2	3	3
8	Процедура циклічного замикання; квазіконтинуальність оберненого простору. Застосування методу ЛКАО для опису електронної структури ідеального кристалу.	2	3	3
9	Визначення матричних елементів гамільтоніана методом Хюккеля.	2		3
	Тема 4. ОСНОВИ І ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ПСЕВДОПОТЕНЦІАЛА			
10	Колективізовані електрони і перехід Мотта. Базис ортогоналізованих плоских хвиль(ОПХ). Розклад хвильових функцій по ОПХ	2		3
11	Псевдохвильове рівняння, псевдопотенціал; властивості псевдопотенціалу. Факторизація матричних елементів псевдопотенціалу.	2		3
12	Самоузгоджене екранування локального псевдопотенціалу. Теорія збурень по псевдопотенціалу.	2	2	3
13	Енергія електронної підсистеми; причини розбіжності.	2		3
14	Повна внутрішня енергія металу. Електростатична енергія, її розрахунок методом Евальда – Фукса	2	3	4

15	Термодинамічні характеристики металів і бінарних неупорядкованих сплавів заміщення. Закон дисперсії фононів в металах.	2		3
	Підсумкова модульна контрольна робота			2
	ВСЬОГО	30	14	46

Загальний обсяг **90** год., в тому числі:

Лекції – **30** год.

Лабораторні роботи – **14** год.

Самостійна робота – **46** год.

ЗАВДАННЯ МОДУЛЬНОЇ КОНТРОЛЬНОЇ РОБОТИ

1. Електронне багаточастинкове рівняння Шрьодінгера.
2. Метод Хартрі, його недоліки. Метод Хартрі – Фока. Детермінант Фока.
3. Пошук самоузгодженого потенціалу методом ітерацій. Проблема ортогональності, її розв'язання.
4. Застосування методу ЛКАО для опису електронної структури ідеального кристалу.
5. Базис ортогоналізованих плоских хвиль(ОПХ). Розклад хвильових функцій по ОПХ.
6. Псевдохвильове рівняння, псевдопотенціал; властивості псевдопотенціалу.
7. Факторизація матричних елементів псевдопотенціалу. Структурна сума.
8. Теорія збурень по псевдопотенціалу.
9. Наближення сфери Фермі.
10. Самоузгоджене екранування локального псевдопотенціалу.
11. Електростатична енергія, її розрахунок методом Евальда – Фукса.
12. Термодинамічні характеристики металів і бінарних неупорядкованих сплавів заміщення.

ПИТАННЯ НА ЕКЗАМЕН

1. Запис повного багаточастинкового гамільтоніану.
2. Ядерна і електронна підсистеми.
3. Адіабатичне наближення.
4. Комутатор адіабатичного і електронного гамільтоніанів.
5. Електронне багаточастинкове рівняння Шредінгера.
6. Метод Хартрі, його недоліки.
7. Метод Хартрі – Фока.
8. Детермінант Фока.
9. Самоузгоджений потенціал.
10. Пошук самоузгодженого потенціалу методом ітерацій.
11. Проблема ортогональності, її розв'язання.
12. Інтеграли перекриття; класифікація об'єктів з величиною інтегралу перекриття.
13. Розклад хвильової функції системи по атомарних хвильових функціях
14. Пошук власних значень енергії і коефіцієнтів розкладу.
15. Застосування методу ЛКАО до молекул з S – валентними електронами.
16. Процедура циклічного замикання.
17. Квазіконтинуальність оберненого простору.

18. Застосування методу ЛКАО для опису електронної структури ідеального кристалу.
19. Визначення матричних елементів гамільтоніана методом Хюккеля.
20. Колективізовані електрони і перехід Мотта. Базис ортогоналізованих плоских хвиль(ОПХ).
21. Розклад хвильових функцій по ОПХ
22. Псевдохвильове рівняння, псевдопотенціал; властивості псевдопотенціалу.
23. Факторизація матричних елементів псевдопотенціалу
24. Самоузгоджене екранування локального псевдопотенціалу
25. Теорія збурень по псевдопотенціалу.
26. Енергія електронної підсистеми; причини розбіжності.
27. Повна внутрішня енергія металу.
28. Електростатична енергія, її розрахунок методом Евальда – Фукса
29. Термодинамічні характеристики металів і бінарних неупорядкованих сплавів заміщення.
30. Закон дисперсії фононів в металах.

9. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

Основна: (Базова)

1. В.В. Поживатенко. Сучасні проблеми фізики. Теорія твердого тіла. Миколаїв, «Іліон», 2022, 73 с.
2. А.П. Шпак, Ю.А. Куницький, В.Є. Федоров. Електронна структура та фізичні властивості твердих тіл. Київ.- КНУ.-2004.-92 с.
3. У. Харрісон. Псевдопотенціали теоретично металів. М.-«Мир».-1977.-496 с.
4. У. Харрісон. Електронна структура та властивості твердих тіл. М.-«Світ».-1983.-314 с.

Додаткова:

1. У. Харрісон. Теорія твердого тіла. М.- «Мир».-1982.- 607 с.
2. С. Хейне, Д. Коєн. Теорія псевдопотенціалу. М.- «Мир».-1987.- 566 с.
3. Н. Ашкрофт, Н. Мермін. Фізика твердого тіла. М.- «Мир»-1979.- 420 с.
4. Обчислювальні методи теорії твердого тіла. Збірник статей. М.-«Мир».-1985.- 400 с.