

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет

Кафедра фізики металів



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Комп'ютерне моделювання та дизайн матеріалів

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки
спеціальність 104 Фізика та астрономія
освітній ступінь Бакалавр
освітня програма Фізичне матеріалознавство/Неметалічне матеріалознавство

вид дисципліни Вибіркова

В. С. С. С.

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2022/2023</u>
Семестр	<u>7</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>7</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)


КИЇВ – 2022

Розробники²: Плюшай Інна Вячеславівна кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
доцент кафедри фізики металів

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

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізики металів


(підпис)

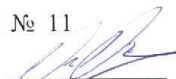
(Курилук В.В.)
(прізвище та ініціали)

Протокол від « 20 » травня 2022 р. за № 8

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

Протокол від «10» червня 2022 року за № 11

Голова науково-методичної комісії


(підпис)

(Оліх.О.Я.)
(прізвище та ініціали)

² Розробляється 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 студентами теоретичних основ сучасних методів комп'ютерного моделювання та дизайну матеріалів, зокрема методів розрахунку атомної та електронної структури матеріалів та ознайомлення студентів з відповідними сучасними програмними пакетами; набуття первинних навичок роботи з вибраними розрахунковими пакетами.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основи математичного аналізу, математичного моделювання та програмних пакетів, квантової механіки.
2. Вміти застосовувати попередні знання з курсів математичного аналізу, математичного моделювання та програмних пакетів, квантової механіки;
3. Володіти елементарними навичками математичних перетворень, побудови алгоритмів, програмування, опису квантових систем.

3. Анотація навчальної дисципліни / референс:

В рамках курсу «Комп'ютерне моделювання та дизайн матеріалів» вивчаються: методи розрахунку електронної та атомної структури матеріалів починаючи від молекули, кластера, нанокристала та закінчуючи реальними кристалами: метод молекулярної динаміки та Монте-Карло; 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; ТФГ (теорія функціоналу густини) тощо;

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

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

Інтегральної:

- 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 комплексністю та невизначеністю умов.

Загальних:

- ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.
- ЗК3. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.
- ЗК7. Навички здійснення безпечної діяльності.
- ЗК9. Визначеність і наполегливість щодо поставлених завдань і взятих обов'язків.
- ЗК12. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово.

Фахових:

- ФК1. Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії.
- ФК5. Здатність виконувати обчислювальні експерименти, використовувати чисельні методи для розв'язування фізичних та астрономічних задач і моделювання фізичних систем.
- ФК6. Здатність моделювати фізичні системи та астрономічні явища і процеси.
- ФК9. Здатність працювати з джерелами навчальної та наукової інформації.

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
--	---------------------------------	----------------------	---------------------------

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

Код	Результат навчання			оцінці з дисципліни
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; 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.;	Лекції Самостійна робота	Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, іспит	50
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;	Лекції Самостійна робота Лабораторні роботи	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання лабораторних робіт, іспит	20
2.2	Вміти: 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.	Лекції Самостійна робота Лабораторні роботи	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання лабораторних робіт, іспит	20
3.1.	Демонструвати спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією, ведення професійної наукової дискусії	Лекції Самостійна робота Лабораторні роботи	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, іспит	5
3.2.	Письмово відображувати та презентувати результати своїх досліджень українською мовою	Лекції Самостійна робота Лабораторні роботи	Модульна контрольна робота, Звіти про виконання лабораторних робіт, іспит	5

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

Результати навчання дисципліни	1.1	2.1	2.2	3.1	3.2
Програмні результати навчання					

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 фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики.	+	+		+	+
ПРН9. Мати базові навички проведення теоретичних та/або експериментальних наукових досліджень з окремих спеціальних розділів фізики або астрономії, що виконуються індивідуально (автономно) та/або у складі наукової групи.			+		
ПРН16. Мати навички роботи із сучасною обчислювальною технікою, вміти використовувати стандартні пакети прикладних програм і програмувати на рівні, достатньому для реалізації чисельних методів розв'язування фізичних задач, комп'ютерного моделювання фізичних та астрономічних явищ і процесів, виконання обчислювальних експериментів.		+	+		
ПРН22. Розуміти значення фізичних досліджень для забезпечення сталого розвитку суспільства.	+	+		+	+
ПРН24. Розуміти місце фізики та астрономії у загальній системі знань про природу і суспільство та у розвитку суспільства, техніки і технологій.	+			+	+
ПРН26. Знати основні сучасні фізичні теорії, що пов'язані з поясненням властивостей матеріалів; вміти застосовувати їх до пояснення властивостей неметалічних систем з різним функціональним призначенням.	+	+		+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1: РН 1.1, 3.2- 10 балів / 5 балів
2. Захист звітів лабораторних робіт 1: РН 2.1-2, 3.1-2 - 10 балів / 5 балів
3. Захист реферату 1: РН 1.1, 3.1 - 10 балів / 5 балів
4. Модульна контрольна робота 2: РН 1.1, 3.2 - 10 балів / 5 балів
5. Захист звітів лабораторних робіт 2: РН 2.1-2, 3.1-2 - 10 балів / 5 балів
6. Захист реферату 2: РН 1.1, 3.1 - 10 балів / 5 балів

- підсумкове оцінювання: у формі іспиту

Підсумкова оцінка з освітнього компонента в цілому, підсумковою формою контролю за яким встановлено іспит, визначається як сума оцінок (балів) за всіма успішно оціненими результатами навчання під час семестру (оцінки нижче мінімального порогового рівня до підсумкової оцінки не додаються) та оцінки, отриманої під час іспиту.

Формою проведення іспиту є написання письмової роботи з подальшою усною співбесідою. Результатами навчання, які оцінюються на іспиті, є РН 1.1-3.2. Максимальна кількість балів, яка може бути отримати здобувачем освіти під час іспиту, становить 40 балів за 100 бальною шкалою.

Перескладання семестрового контролю з метою покращення позитивної оцінки не допускається.

- умови допуску до підсумкового іспиту:

Обов'язковою умовою допуску до іспиту є відпрацювання всіх лабораторних робіт та написання модульних контрольних робіт. Здобувач освіти не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 30 балів.

7.2. Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи 1 - 2 проводяться по завершенні тематичних лекцій.

Захист звітів лабораторних робіт проводиться упродовж семестру.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	Лабораторні	Самостійна робота
1	<p>ТЕМА 1. Вступ. Підходи до пошуку матеріалів із заданими фізичними властивостями. Комп'ютерний дизайн матеріалів. Перелік основних методів чисельного моделювання атомної та електронної структури матеріалів. Їх можливості та обмеження застосування – часова та просторова шкала.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекцій.</p> <p>Ознайомлення із сучасним станом в галузі пошуку та створення нових матеріалів (самостійне інтернет-дослідження).</p>	2		8
2	<p>ТЕМА 2. Метод молекулярної динаміки та емпіричні потенціали.</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. Виведення 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>с.р.с. Вивчення матеріалу лекцій.</p> <p>Ознайомлення із переліком програмних пакетів молекулярної динаміки – умови розповсюдження та особливості реалізації.</p>	8	16	44
3	<p>ТЕМА 3. Метод ЛКАО - лінійна комбінація атомних орбіталей.</p> <p>Основні положення метода ЛКАО (лінійна комбінація атомних орбіталей). Простий іонний зв'язок (ЛКАО). Зв'язуючі та антизв'язуючі орбіталі. Ступінь іонності та ступінь ковалентності.</p> <p>Простий ковалентний зв'язок. Електронна структура двоатомних молекул в рамках ЛКАО (випадок неперехідних елементів). Матричні елементи гамільтоніана (по s- та p-орбіталях). Заповнення молекулярних рівнів гомеополарних двоатомних молекул та їх властивості.</p> <p>Розрахунок енергетичних зон кристалів методом ЛКАО - на прикладі кристала типу CsCl. Обернена ґратка, зона Брілюєна, симетричні напрямки. Наближення найближчих сусідів. Дисперсія електронів.</p> <p>Кристалічні матричні елементи. Метод Хюккеля. Параметризація Харісона.</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>	6	4	24

4	<p>ТЕМА 4. Електронні стани. Першопринципні розрахунки. Рівняння Хартри-Фока.</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 лекції.</p> <p>Особливості сумування по зоні Брілюєна: застосування симетрії.</p>	4	4	16
5	<p>ТЕМА 5. Сучасні методи розрахунку електронної структури твердих тіл</p> <p>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>Теоретичні основи сучасних методів розрахунку електронної структури матеріалів та відповідні сучасні програмні пакети:</p> <p>https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_quantum_chemistry_and_solid-state_physics_software</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Електронні стани неідеального кристалу. Рівняння для хвильової функції електрона в полі домішки.</p>	4	8	24
6	<p>ТЕМА 4. Теорія Функціонала Густини</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>GAUSSIAN , ABINIT, VASP, GAMESS – умови розповсюдження та особливості реалізації.</p>	4	8	22
	<i>Підсумкова модульна контрольна робота</i>		2	1
	ВСЬОГО	28	42	139

Примітка: слід зазначити теми, винесені на самостійне вивчення

Загальний обсяг 210 год.¹, в тому числі:

Лекцій – **28 год.**

Семінари – **0 год.**

Практичні заняття – **0 год.**

Лабораторні заняття – **42 год.**

Тренінги – **0 год.**

Консультації - **1 год.**

Самостійна робота - **139 год.**

¹ Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.

9. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА²:

Основна: (Базова)

1. R.Martin Electronic Structure. Basic theory and practical methods. Cambridge 2004
[інтернет-ресурс : https://cds.cern.ch/record/821265/files/0521782856_TOC.pdf]
2. Herbst, Michael F.; Levitt, Antoine; Cancès, Eric (2021). "DFTK: A Julian approach for simulating electrons in solids". JuliaCon Proceedings. 3 (26): 69. doi:10.21105/jcon.00069
[інтернет-ресурс : <https://www.semanticscholar.org/paper/DFTK%3A-A-Julian-approach-for-simulating-electrons-in-Herbst-Levitt/8477bb5e38f87a6739fe05f55d1bcd3ca36a68db>]
3. Хацевич О.М., Курта С. А. Основи квантової хімії : навч. посіб.; ДВНЗ "Прикарпат. нац. ун-т ім. Василя Стефаника", Ф-т природн. наук, Каф. хімії. - Івано-Франківськ : Прикарпат. нац. ун-т ім. Василя Стефаника, 2019. - 259 с.
[НБУ Вернадського]
4. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. Т.1,2. М.: Мир, 1983.
[бібліотека кафедри, бібліотека факультету]
5. Ашкрофт А., Мермин Дж. Физика твердого тела. Т.1,2. М.: Мир, 1979,
[бібліотека кафедри, бібліотека факультету]
6. Д.В. Хеерман. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990. 176 с.
[бібліотека факультету]
7. Х. Гулд, Я.Тобочник Компьютерное моделирование в физике. Москва, Мир,1990, т.1-2
[бібліотека факультету]
8. В.Кон Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности. – Успехи физ. наук, Том 172, №3.
[інтернет-ресурс:
http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=ufn&paperid=1994&option_lang=rus]
9. Курилюк В.В. Методична розробка з курсу «Теорія та моделювання наноструктур» – Вінниця: ТОВ «Нілан-ЛТД», 2017. – 28 с.
[бібліотека кафедри]

Додаткова:

1. Oganov A. Modern methods of crystal structure prediction. Weinheim, Germany : Wiley-VCH. 2011 - ISBN: 9783527409396. - 267p.
2. Шпак А.П., Куницький Ю.А., Федоров В.С. Електронна структура та властивості твердих тіл. Київ 2004
3. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М. Наука, 1978.
4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: Наука , 1978.- 792 с.
5. Займан Дж. Принципы теории твердого тела, М.Мир, 1966.
6. Маделунг О. Теория твердого тела. М. Наука, 1980.
7. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М. Наука, 1967.
8. Grozin. Introduction to *Mathematica* for Physicists. Publisher: Springer, 2013, 197 p.
9. Гусак А.М., Ковальчук А.О. Фізика твердого тіла (Solid State Physics): білінгвальний курс: навч. посіб. для студ. вищ. навч. закл. - Черкаси : Видавництво ЧНУ ім. Б. Хмельницького, 2012. - 204 с.
10. Моделі твердофазних реакцій - від молекулярної динаміки до середньопольового кінетичного методу: монографія / В. М. Безпальчук, О. О. Богатирьов, А. М. Гусак. - Черкаси : Гордієнко Є. І., 2017. - 148 с.

10. Додаткові ресурси:

1. https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_quantum_chemistry_and_solid-state_physics_software
2. <https://www.abinit.org/>

² В тому числі Інтернет ресурси