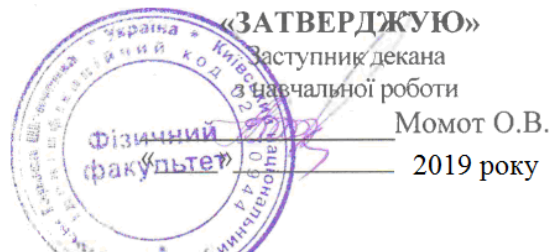


КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет

Кафедра загальної фізики та кафедра фізики металів



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

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 ступінь магістр
(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)
освітня програма Фізика наносистем
(назва освітньої програми)
вид дисципліни обов'язкова

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2019 /2020</u>
Семестр	<u>2</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>6</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>іспит</u>

Викладачі: доцент Плющай Інна Вячеславівна

доцент Козаченко Віктор Васильович

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

Пролонговано: на 2020/2021 н.р. _____ «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

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

КИЇВ – 2019

Розробники¹: 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 загальної фізики


(підпис)

(Боровий М.О.)
(прізвище та ініціали)

Протокол № 10 від 7 травня 2019 р.

ЗАТВЕРДЖЕНО
Зав. кафедри фізики металів


(підпис)

(Макара В.А.)
(прізвище та ініціали)

Протокол № 14 від «24» квітня 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)

¹ 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; методи графічного програмування та алгоритми створення віртуальних приладів, що керують виконанням фізичного експерименту.

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.

Згідно вимог проекту 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:

Інтегральних:

Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі фізики наносистем, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань.

Загальних:

- Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу. (ЗК1)
- Навички використання новітніх інформаційних і комунікаційних технологій. (ЗК2)
- Здатність до пошуку, оброблення на аналізі інформації з різних джерел. (ЗК4)
- Здатність використовувати основні методи програмування та моделювання у фізиці. (ЗК7)
- Здатність застосовувати знання в галузі методів вимірювання у фізиці (ЗК8)

Фахових:

- Здатність застосовувати знання теорій опису фізичних властивостей наносистем різних типів (ФК5).
- Здатність використовувати знання й уміння в галузі практичного використання комп'ютерних технологій для дослідження наносистем (ФК15).

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	Лекції Самостійна робота	Модульна контрольна робота, перевірка	25

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

	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; перелік емпіричних потенціалів, що використовуються при МД моделюванні та критерії їх вибору.;		рефератів та інших форм самостійної роботи, іспит	
1.2	знати основні методи програмування мовою графічного програмування G.	Лекції Самостійна робота	Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, іспит	25
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 Практичні роботи	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит	10
2.2	Вміти: 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.	Лекції Самостійна робота Практичні роботи	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит	10
2.3	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 Практичні роботи	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит	10
2.4	Вміти: створювати віртуальні прилади для інтегрування та узгодження роботи реальних приладів з відповідними інтерфейсами під час виконання фізичного експерименту.	Лекції Самостійна робота Практичні роботи	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та	10

			інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит	
3.1.	Демонструвати спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією, ведення професійної наукової дискусії	Лекції Самостійна робота Практичні 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 Практичні роботи	Модульна контрольна робота, Звіти про виконання практичних робіт, іспит	5

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	2.3	2.4	3.1	3.2
ПРН 1.13. Знати методи графічного програмування з пакетом LabView	+	+						
ПРН 1.14. Знати програмні пакети - GAUSSIAN , ABINIT, VASP, GAMESS		+				+		
ПРН 2.10. Вміти визначати метод розрахунку, необхідний для розв'язку конкретної наукової проблеми в області фізики наносистем	+			+				
ПРН 2.11. Вміти обирати відповідні програмні пакети для наукових розрахунків				+				
ПРН 3.1. Володіти здатністю презентувати результати своїх досліджень на наукових конференціях, семінарах, практично використовувати іноземну мову (в першу чергу - англійську) у науковій діяльності			+	+	+			
ПРН.4.1. Аналізувати наукові праці, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання							+	+
ПРН 4.2. Здійснювати моніторинг наукових джерел інформації відносно досліджуваної проблеми	+	+					+	+
ПРН.5.1. Знати ґрунтовні знання предметної області та розуміння професії	+	+					+	+

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 практичних робіт 1: РН 2.1-2.4, 3.2 - 10 балів / 5 балів
3. Захист реферату 1: РН 1.1, 3.1 - 10 балів / 5 балів
4. Модульна контрольна робота 2: РН 1.2, 3.2 - 10 балів / 5 балів
5. Захист звітів практичних робіт 2: РН 2.1-2.4, 3.2 - 10 балів / 5 балів
6. Захист реферату 2: РН 1.2, 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 практичних робіт та написання модульних контрольних робіт. Здобувач освіти не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 20 балів.

7.2. Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи 1 - 2 проводяться по завершенні тематичних лекцій з Розділів 1-2 відповідно. 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	практичні	Самостійна робота
<i>Розділ 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 I</i>	1		
Розділ 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 проєктів 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.², 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.**

² Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.

9. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА³:

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. Фишер И. З. Статистическая теория жидкостей. Серия: Современные проблемы физики. М.: Наука. 1961г. 280 с.
8. Grozin. Introduction to *Mathematica* for Physicists. Publisher: Springer, 2013, 197 p.
9. Дж. Кристиан. Теория превращений в металлах и сплавах. М.: Мир, 1978, 806 с.
10. LabVIEW для всех / Джеффри Тревис: Пер. с англ. Клушин Н. А. ~ М.: ДМК Пресс; ПриборКомплект, 2005. ~ 544 с.

Додаткова:

1. Шпак А.П., Куницький Ю.А., Федоров В.С. Електронна структура та властивості твердих тіл. Київ 2004
2. Займан Дж. Модели беспорядка. М: Мир, 1982, 423 с.
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. Физика твердого тела / Энциклопедический словарь под ред. В.Г.Барьяхтара. - Киев: Наукова думка, 1966. - 452 с.
9. http://www.ni.com/pdf/manuals/371780n_0114.pdf

10. Додаткові ресурси:

1. http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_chemistry_computer_programs
2. <https://www.abinit.org/>

³ В тому числі Інтернет ресурси

