

ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
“УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ”
ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ



“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з наукової
роботи УжНУ

Студеняк І.П.

28 вересня 2020 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
КВАНТОВО-МЕХАНІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ
ВЛАСТИВОСТЕЙ ТВЕРДИХ ТІЛ**

| | |
|---------------------|-----------------------------------|
| Рівень вищої освіти | третій (освітньо-науковий) |
| Галузь знань | 10- Природничі науки |
| Спеціальність | 104 Фізика та астрономія |
| Освітньо програма | Фізика та астрономія |
| статус дисципліни | вибіркова |
| Мова навчання | українська |

Ужгород 2020

Робоча програма навчальної дисципліни «**Квантово-механічне моделювання фізичних властивостей твердих тіл**» для здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії галузі знань **10 Природничі науки** спеціальності **104 Фізика та астрономія** освітньої програми **Фізика та астрономія** .

Розробники: Глухов К.Є кандидат-фізико математичних наук, доцент

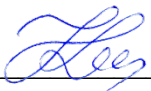
Робочу програму розглянуто та затверджено на засіданні кафедри **фізики напівпровідників**

протокол № 1 від « 23 » вересня 2020 р.

Завідувач кафедри  Височанський Ю.М.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

протокол № 1 від « 23 » вересня 2019 р.

Голова науково-методичної комісії  Карбованець М. І.

Програма навчальної дисципліни “**Квантово-механічне моделювання фізичних властивостей твердих тіл**” складена відповідно до освітньо-наукової підготовки фахівців третього рівня вищої освіти напряму 104 – фізика та астрономія

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

| Найменування показників | Розподіл годин за навчальним планом | |
|--|-------------------------------------|-----------------------|
| | Денна форма навчання | Заочна форма навчання |
| Кількість кредитів ЄКТС – 7 | Рік підготовки: | |
| Загальна кількість годин – 210 | 1-й | 1-й |
| Кількість модулів – 2 | Семестр: | |
| Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 3 самостійної роботи аспіранта – 5 | 1,2 | 1,2 |
| | Лекції: 30 | |
| | 40 | 16 |
| | Практичні (семінарські): | |
| | 44 | 8 |
| Вид підсумкового контролю: залік, екзамен | Лабораторні: | |
| | | |
| Форма підсумкового контролю: усна | Самостійна робота: | |
| | 126 | 186 |

2. МЕТА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Метою вивчення навчальної дисципліни «**Квантово-механічне моделювання фізичних властивостей твердих тіл**» – формування цілісної системи знань та навиків в галузі теорії твердого тіла і оволодіння методиками проведення *ab initio* моделювання фізичних властивостей твердих тіл.

Місце дисципліни в структурі освітньо-наукової програми: спецкурс відноситься до дисциплін вибіркової частини циклу професійної підготовки, за результатами яких здобувачі здають залік і іспит та виконують навчальний процес по спеціальності 104-«фізика і астрономія».

Відповідно до освітньої програми, вивчення дисципліни сприяє формуванню у здобувачів вищої освіти таких компетентностей:

Інтегральна: здатність розв'язувати комплексні задачі та проблеми в галузі фізики та астрономії, здійснювати у цій галузі професійну та дослідницько-інноваційну діяльність, що передбачає глибоке переосмислення наявних і створення нових цілісних знань та професійної практики.

Загальні компетентності:

- ЗК-1 здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу;
- ЗК-3 здатність проведення самостійних досліджень на сучасному рівні;
- ЗК-4 здатність до пошуку, обробки на аналізу інформації з різних джерел;
- ЗК-5 здатність генерувати нові ідеї (креативність);
- ЗК-6 здатність працювати в міжнародному науковому просторі;
- ЗК-10 здатність комунікації на фахову тематику з нефакхівцями.

Фахові компетентності:

- ФК-1 здатність застосовувати фізичні знання для систематизації різноманітних пов'язаних фактів в області теорії функціоналу електронної густини;
- ФК-2 здатність визначати завдання і проблематику фізичного дослідження в галузі першопринципного моделювання процесів у твердих тілах та застосовувати найбільш поширених наближень, що застосовуються при *ab initio* описі фізичних параметрів твердих тіл;
- ФК-3 здатність вирізняти із накопичених спостережень відтворювані експериментальні факти;
- ФК-4 здатність створювати та порівнювати між собою фізичні та математичні моделі фізичних об'єктів, процесів та явищ;
- ФК-5 здатність оцінювати моделі з точки зору їх відповідності фізичним об'єктам, процесам та явищам, для пояснення яких застосовуються дані моделі;
- ФК-6 вміння здійснювати комп'ютерне моделювання фізичних процесів, у тому числі із застосуванням існуючого програмного забезпечення.

3. ПЕРЕДУМОВИ ДЛЯ ВИВЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Необхідними передумовами вивчення навчальної дисципліни «Квантово-механічне моделювання фізичних властивостей твердих тіл» є знання розділів загальної фізики, теоретичної фізики, квантової механіки, фізики конденсованого стану, фізики напівпровідників. У програмі використовуються результати найактуальніших досягнень в області першопринципних розрахунків, комп'ютерного моделювання та їх практичного застосування.

4. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Відповідно до освітньої програми «**Квантово-механічне моделювання фізичних властивостей твердих тіл**», вивчення навчальної дисципліни повинно забезпечити досягнення здобувачами вищої освіти таких програмних результатів навчання (ПРН):

| Програмні результати навчання | Шифр ПРН |
|--|----------|
| Сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі фізики і астрономії та суміжних галузей знань. | 1.1. |
| Фундаментальні праці провідних зарубіжних вчених та наукових шкіл у галузі дослідження. | 1.2. |
| Формулювати мету власного наукового дослідження в контексті світового наукового процесу, усвідомлювати його актуальність і значення для розвитку інших галузей науки, суспільно-політичного, економічного життя. | 2.1 |
| Формулювати загальну методологічну базу власного наукового дослідження. | 2.2. |
| Проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, які приводять до отримання нових знань. | 2.3. |
| Формулювати наукову проблему з огляду на стан її наукової розробки та сучасні наукові тенденції. | 2.5. |
| Формулювати робочі гіпотези та моделі досліджуваної проблеми. | 2.6. |
| Аналізувати наукові праці в галузі сучасної фізики, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання. | 2.7 |
| Здійснювати моніторинг наукових джерел інформації відносно досліджуваної проблеми. | 2.8. |
| Визначати інформаційну цінність джерел шляхом порівняльного аналізу з іншими джерелами. | 2.9. |

Очікувані результати навчання, які повинні бути досягнуті здобувачами освіти після опанування навчальної дисципліни «**Квантово-механічне моделювання фізичних властивостей твердих тіл**»:

| Очікувані результати навчання з дисципліни | Шифр ПРН |
|--|----------|
| Узагальнення і систематизація знань та основних концепцій, теоретичних і практичних проблем в галузі сучасної фізики, зокрема, <i>ab initio</i> моделювання. | 1.1 |
| Знати фундаментальні поняття теорії функціоналу електронної густини, які базуються на фундаментальних працях провідних вчених та наукових шкіл у галузі дослідження. | 1.2 |
| Знати основи теорії квазічастинкових станів, як в електронній так і коливній підсистемах. | 1.2 |
| Знати класифікацію наближень обмінно-кореляційної частини функціонала електронної густини та межі їх застосування. | 1.2 |
| Вміти обґрунтувати вибір наближення для здійснення моделювання фізичних властивостей кристалічного матеріала. | 2.6 |
| Аналізувати існуючі підходи та результати моделювання властивостей та явищ в твердих тілах. | 2.7 |
| Вміти орієнтуватись в науковій і науково-популярній літературі та мати представлення про основні тенденції розвитку <i>ab initio</i> методів в сучасній фізиці. | 2.7 |

5. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Засоби оцінювання та методи демонстрування результатів навчання

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання з навчальної дисципліни є: заліки, реферати, виступи на практичних (семінарських) заняттях, домашні завдання, підготовка презентації по вибраній темі.

Контрольні заходи включають такі **форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання**: поточний, модульний та підсумковий контроль.

Поточний контроль – оцінювання рівня знань, умінь і навичок аспірантів, що здійснюється в ході навчального процесу проведенням усного опитування, контрольної роботи, тестування, домашнього завдання тощо.

Результатом *модульного контролю* є модульна бальна оцінка, за якою підбивається підсумок роботи аспірантів впродовж модуля у відповідності до кредитно-модульної системи оцінювання знань (КМСОЗ).

Підсумковий семестровий контроль проводиться у формі заліку або екзамену з конкретної навчальної дисципліни в обсязі навчального матеріалу, що визначений навчальною програмою, та в терміни, встановлені графіком навчального процесу. При семестровому контролі отримані здобувачем згідно КМСОЗ переводяться в оцінки за національною шкалою та за шкалою ЄКТС.

Комплексний показник успішності здобувача третього рівня вищої освіти, його обізнаності в предметі, що вивчається, характеризує якість його знань, систематичність, творчість, активність та самостійність. Максимальна сума балів за всі види робіт (контрольні, самостійне вивчення, практичні (семінарські) заняття) з даного курсу становить 100 балів.

За роботу на протязі семестру в залежності від форми контролю виставляється така максимальна кількість балів:

- Поточний контроль за змістовним модулем та самостійна робота 1-50 балів
- Виконання практичних робіт та їхній захист 1-10 балів
- Контрольна робота за змістовним модулем 1-40 балів

Форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання

Форми поточного контролю: самостійна робота, опитування.

Форма модульного контролю: контрольна робота.

Форма підсумкового семестрового контролю: залік, іспит.

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 1)

| Поточне оцінювання та самостійна робота | | | | Модульна контрольна робота | Сума |
|---|----|----|----|----------------------------|------|
| T1 | T2 | T3 | T4 | 20 | 100 |
| 20 | 20 | 20 | 20 | | |

T1, T2 ... – теми

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 2)

| Поточне оцінювання та самостійна робота | | | | Модульна контрольна робота | Сума |
|---|----|----|----|----------------------------|------|
| T1 | T2 | T3 | T4 | 20 | 100 |
| 20 | 20 | 20 | 20 | | |

T1, T2 ... – теми

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи

Модульна контрольна робота здійснюється у письмовій формі шляхом відповідей на питання тестових завдань. Кожна правильна відповідь оцінюється певною кількістю балів. Максимальна кількість балів за кожний модуль становить 100 балів. Мінімальна кількість балів, за якої робота вважається виконаною становить 60 балів.

Критерії оцінювання підсумкового семестрового контролю

Підсумковий семестровий контроль з дисципліни «
» здійснюється у формі заліку та екзамену.

Залік проводиться в усній формі шляхом співбесіди. Результати заліку оцінюються за двобальною шкалою: „зараховано, „незараховано”.

Підсумкова оцінка " зараховано"/"не зараховано" визначається наступними критеріями:

- " зараховано" - якщо аспірант достатньо чітко і грамотно відповідає на питання в межах матеріалу викладеного у рамках лекційних занять, може показати та обґрунтувати взаємозв'язок різних частин матеріалу, пройденого у межах матеріалу навчальної дисципліни; демонструє здатність до мислення, при відповіді на питання розмірковує, спираючись на отримані у рамках курсу знання, не допускає істотних неточностей у відповіді, правильно вибудовує логіку вирішення типових завдань;

- "не зараховано" - якщо аспірант викладає основні питання недостатньо чітко або допускає істотні помилки при їх викладі, не може пояснити зв'язків у рамках викладеного матеріалу, аспірант не знає значної частини програмного матеріалу, не може дати точних визначень понять, пройдених у рамках курсу, дає розпливчаті формулювання і не володіє в належній мірі термінологією, плутається при відповіді на додаткові питання, не володіє прийомами вирішення типових завдань.

За бажанням аспіранта результуюча підсумкова залікова оцінка може бути визначена як інтегрована оцінка засвоєння всіх тем дисципліни і кількісно дорівнює середньому арифметичному балів, отриманих за кожний модуль.

Екзамен проводиться в усній формі шляхом співбесіди. Результати екзамену оцінюються за чотирибальною шкалою: „відмінно”, „добре”, „задовільно”, „незадовільно”.

Оцінка „відмінно” виставляється в тому разі, коли аспірант бездоганно оволодів всіма розділами програми, дав глибокі, чіткі і вичерпні відповіді на всі основні і додаткові запитання, виявив розуміння фізичної суті програмового матеріалу, вільне володіння фактичним матеріалом та відповідним математичним апаратом, вміння грамотно обробляти результати експериментальних вимірювань з метою отримання заданої точності отриманих даних, кваліфіковано використовувати набуті знання для розв'язання конкретних практичних задач.

Оцінка „добре” виставляється тоді, коли аспірант виявив повне знання і розуміння програмового матеріалу, добре оволодів математичним апаратом курсу, може використовувати набуті знання в практичній діяльності, дав вичерпні відповіді на всі запитання, але під час відповіді допускав окремі нечіткі формулювання і незначні неточності.

Оцінка „задовільно” виставляється в тому разі, коли аспірант в основному знає і розуміє фактичний матеріал курсу, дав в основному правильні відповіді на запитання, виявив уміння розібратися в усьому матеріалі курсу, вміння використовувати відповідний математичний апарат, але не може ґрунтовно пояснити окремі положення пройденого курсу, допускає неточності при використанні математичного апарату, недостатньо вміє застосовувати набуті знання для розв’язання конкретних практичних задач.

Оцінка „незадовільно” виставляється тоді, коли аспірант не оволодів матеріалом даного курсу, виявив суттєві прогалини в знаннях основного програмового матеріалу, коли він під час відповіді на запитання виявив нерозуміння фізичної сутності основних понять та термінів навчальної дисципліни, допускає плутанину, слабо володіє математичним апаратом, не може застосовувати набуті знання для розв’язування конкретних практичних задач, тобто виявив відсутність мінімально необхідної кількості знань з даного курсу.

За бажанням аспіранта результуюча підсумкова екзаменаційна оцінка може бути визначена як інтегрована оцінка засвоєння всіх тем дисципліни і кількісно дорівнює середньому арифметичному балів, отриманих за кожний модуль.

Переведення результатів, отриманих за 100-бальною шкалою оцінювання в національну 4-х бальну та шкалу за системою ECTS здійснюється за наступною схемою:

| Оцінка за шкалою балів | Залік | ECTS | |
|------------------------|--------------|--------|---|
| | | Оцінка | Характеристика |
| 90 та вище | зараховано | A | відмінно |
| 82-89 | зараховано | B | добре |
| 74-81 | зараховано | C | добре |
| 64-73 | зараховано | D | задовільно |
| 60-64 | зараховано | E | задовільно |
| 35-59 | незараховано | FX | незадовільно з можливістю перескладання |
| 1-34 | незараховано | F | незадовільно з обов'язковим повторним навчанням |

Аспірант, який отримав за результатами підсумкового контролю оцінку «незараховано» або «незадовільно» (1-34 балів, F), зобов'язаний пройти повторний курс вивчення дисципліни (під час додаткового семестру) і скласти залік.

Результати підсумкового контролю знань заносяться до залікової та екзаменаційної відомостей.

6. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

6.1. Зміст навчальної дисципліни

Модуль 1

Тема 1. **Вступ.** Моделювання фізичних явищ та процесів з перших принципів. Масштаби фізичних систем та часових проміжків. Різні типи моделей.

Тема 2. **Основи теорії багатоелектронних систем.** Гамільтоніан твердого тіла. Розділення руху електронів та ядер. Адіабатичне наближення, одноелектронні хвильові функції. Принцип Паулі. Детермінант Слеттера.

Тема 3. **Теорія функціонала електронної густини.** Теорія Томаса-Фермі. Однорідний електронний газ. Теореми Хохенберга-Кона-Шема. Кінетична енергія. Вплив зовнішнього поля.

Тема 4. **Псевдопотенціали. Основні відомості та наближення.** Концепція псевдопотенціала. Емпіричний псевдопотенціал. *Ab initio* псевдопотенціали. Псевдопотенціали Тройлера-Мартінза. Переносимість. Проектори Клеймана-Байландера.

Модуль 2

Тема 1. **Обмінний та кореляційний функціонали.** Наближення локальної густини та градієнтне наближення при розрахунках основного стану кристалічних твердих тіл. Мета-GGA та гібридні функціонали.

Тема 2. **Оптичні властивості кристалічних твердих тіл з перших принципів.** Збуджені стани як незайняті Кон-Шемівські стани. Переходи між зайнятим та незайнятим станами зумовлені електричним полем фотона. Електронна спектроскопія енергетичних втрат. Правила відбору.

Тема 3. **Першопринципне моделювання пружних властивостей кристалів.** Елементи теорії пружності. Обчислення тензорів механічної напруги. Лінійна апроксимація напружень для структурної деформації, обчислення пружних констант, C_{ij} та модулів податливості S_{ij} . Розрахунок об'ємних модулів пружності, стисливостей, модуля Юнга та коефіцієнта Пуассона для трьох напрямків для моделювання матеріалу як ізотропного середовища.

Тема 4. **Коливання кристалічної ґратки.** Елементи теорії зв'язаних коливань. Нормальні моди, фонони. Теорема Лідена-Сакса-Теллера. Сили Гелмана-Фенмана. Метод надкомірки та метод лінійного відклику. Матриця силових констант. Дисперсія фононів. Коливна спектроскопія.

6.2. Структура навчальної дисципліни

| Назви змістових модулів і тем | Кількість годин | | | | | |
|--|-----------------------|-------------------------|-------------|----------------------|-------------------|----|
| | Форма навчання: денна | | | | | |
| | Усього | у тому числі | | | | |
| лекції | | практичні (семінарські) | лабораторні | індивідуальна робота | самостійна робота | |
| 1-й семестр | | | | | | |
| Модуль 1 | | | | | | |
| Тема 1. Вступ | 24 | 4 | 4 | | | 16 |
| Тема 2. Основи теорії багатоелектронних систем | 26 | 4 | 6 | | | 16 |
| Тема 3. Теорія функціонала електронної густини. | 26 | 4 | 6 | | | 16 |
| Тема 4. Псевдопотенціали. Основні відомості та наближення. | 25 | 4 | 6 | | | 15 |

| | | | | | | |
|--|-----|----|----|--|--|----|
| Модульна контрольна робота | 4 | 4 | | | | |
| Разом за модуль | 105 | 20 | 22 | | | 63 |
| Разом за семестр | 105 | 20 | 22 | | | 63 |
| 2-й семестр | | | | | | |
| Модуль 2 | | | | | | |
| Тема 1. Обмінний та кореляційний функціонали. | 24 | 4 | 4 | | | 16 |
| Тема 2. Оптичні властивості кристалічних твердих тіл з перших принципів. | 26 | 4 | 6 | | | 16 |
| Тема 3. Першопринципне моделювання пружних властивостей кристалів | 26 | 4 | 6 | | | 16 |
| Тема 4. Коливання кристалічної ґратки. | 25 | 4 | 6 | | | 15 |
| Модульна контрольна робота | 4 | 4 | | | | |
| Разом за модуль | 105 | 20 | 22 | | | 63 |
| Разом за семестр | 105 | 20 | 22 | | | 63 |

Заочна форма навчання

| Назви змістових модулів і тем | Кількість годин | | | | | |
|--|------------------------|-------------------------|-------------|----------------------|-------------------|----|
| | Форма навчання: заочна | | | | | |
| | Усього | у тому числі | | | | |
| лекції | | практичні (семінарські) | лабораторні | індивідуальна робота | самостійна робота | |
| 1-й семестр | | | | | | |
| Модуль 1 | | | | | | |
| Тема 1. Вступ | 24 | 1 | 1 | | | 22 |
| Тема 2. Основи теорії багатоелектронних систем | 27 | 2 | 1 | | | 24 |
| Тема 3. Теорія функціонала електронної густини. | 27 | 2 | 1 | | | 24 |
| Тема 4. Псевдопотенціали. Основні відомості та наближення. | 27 | 2 | 1 | | | 24 |
| Модульна контрольна робота | 1 | 1 | | | | |
| Разом за модуль | 106 | 8 | 4 | | | 94 |
| Разом за семестр | 106 | 8 | 4 | | | 94 |
| 2-й семестр | | | | | | |
| Модуль 2 | | | | | | |
| Тема 1. Обмінний та кореляційний функціонали. | 24 | 1 | 1 | | | 22 |
| Тема 2. Оптичні властивості кристалічних твердих тіл з перших принципів. | 27 | 2 | 1 | | | 24 |
| Тема 3. Першопринципне моделювання пружних властивостей кристалів | 25 | 2 | 1 | | | 22 |
| Тема 4. Коливання кристалічної ґратки. | 27 | 2 | 1 | | | 24 |

| | | | | | | |
|----------------------------|------------|----------|----------|--|--|-----------|
| Модульна контрольна робота | 1 | 1 | | | | |
| Разом за модуль | 104 | 8 | 4 | | | 92 |
| Разом за семестр | 104 | 8 | 4 | | | 92 |

6.3. Теми практичних (семінарських, лабораторних) занять

| № з/п | Назва теми | Кількість годин | |
|--------------|---|-----------------|----------|
| | | денна | заочна |
| 1 | Вступ. Оволодіння основами роботи з пакетами першопринципних розрахунків | 4 | 1 |
| 2 | Моделювання основного стану молекулярної системи. Геометрична оптимізація. Аналіз результатів. | 6 | 1 |
| 3 | Моделювання просторового розподілу електронної густини кристалічних твердих тіл. | 6 | 1 |
| 4 | Одержання та аналіз густини станів, зонного спектру та заселеності енергетичних станів кристалів. | 6 | 1 |
| 5 | Моделювання частотної залежності діелектричної проникності та оптичних характеристик твердих тіл. | 4 | 1 |
| 6 | Баричні залежності параметрів ґратки кристалів. Визначення пружних модулів. Одержання параметрів рівняння стану твердого тіла. | 6 | 1 |
| 7 | Розрахунок коливного спектру кристала. Визначення фоновної густини станів та температурної поведінки термодинамічних функцій. | 6 | 1 |
| 8 | Моделювання спектрів комбінаційного (КР) та інфрачервоного (ІЧ) розсіювання в твердих тілах. Встановлення та аналіз форми коливань, активних в КР та ІЧ спектрах. | 6 | 1 |
| Разом | | 44 | 8 |

6.4. Самостійна робота

| № з/п | Назва теми | Кількість годин | |
|-------|--|-----------------|--------|
| | | денна | заочна |
| 1 | Основи роботи з пакетами першопринципних розрахунків | 16 | 22 |
| 2 | Моделювання основного стану молекулярних систем. | 16 | 24 |
| 3 | Одержання та аналіз густини станів, зонного спектру та заселеності енергетичних станів кристалів. | 16 | 24 |
| 4 | Моделювання частотної залежності діелектричної проникності та оптичних характеристик твердих тіл. | 15 | 24 |
| 5 | Визначення пружних модулів та одержання параметрів рівняння стану твердого тіла. | 16 | 22 |
| 6 | Розрахунок коливного спектру кристала. Визначення фоновної густини станів та температурної поведінки термодинамічних функцій | 16 | 24 |

| | | | |
|---|--|------------|------------|
| 7 | Моделювання спектрів комбінаційного (КР) та інфрачервоного (ІЧ) розсіювання в твердих тілах. | 16 | 22 |
| 8 | Встановлення та аналіз форми коливань, активних в КР та ІЧ спектрах. | 15 | 24 |
| | Разом | 126 | 186 |

7. ІНСТРУМЕНТИ, ОБЛАДНАННЯ ТА ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ, ВИКОРИСТАННЯ ЯКИХ ПЕРЕДБАЧАЄ НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА (у разі потреби)

Технічні засоби: комп'ютерний клас

Лекційний курс передбачає використання технічних засобів навчання, мультимедійних проекторів.

Програмне забезпечення: ABINIT, SIESTA, QUANTUM ESPRESSO

8. РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА ІНФОРМАЦІЇ

Основна література

1. C. Fiolhais F. Nogueira M. Marques (Eds.) «A Primer in Density Functional Theory» Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 2003
2. P. Hohnberg, W. Kohn. Phys. Rev. A, 136, B864(1964).
3. W. Kohn, L. J. Sham. Phys. Rev. A, 140:1133(1965).
4. Ч. Киттель, Квантовая теория твердых тел, М.:«Наука», 1967.
5. П. Ю., М. Кардона, Основы физики полупроводников. М.: Физматлит, 2002.
6. D.R. Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. 24, 89(1928).
7. V. Fock, Z. Phys. 61, 126, 1930.
8. Н.Н. Калиткин, Численные методы. М.: Наука, 1978.
9. W. Heitler, and F. London, Z. Phys. 44, 455 (1927).
10. J. H. Van Vleck, Phys. Rev. 49, 232 (1936).
11. D.R. Inglis, Phys. Rev. 46, 135 (1934).
12. W. Kohn, Rev. Mod. Phys. 71, 1253 (1999).
13. D. Mermin, Phys. Rev. 137, A1441 (1965).
14. R. M. Dreizler, and E. K. U. Gross, Density Functional Theory (Springer, Berlin), 1990.
15. R. G. Parr, and W. Yang, Density Functional Theory of Atoms and Molecules (Oxford University Press, Oxford) 1989.
16. J. P. Perdew, and S. Kurth, 1998, in Density Functionals: Theory and Applications, edited by D. Joubert (Springer, Berlin).
17. R.M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. University of Illinois, Urbana-Champaign, 2004.
18. Density-functional theory of time-dependent phenomena. E. K. U. Gross, J. F. Dobson.
19. M. Petersilka, in: Topics in Current Chemistry, vol. 181, edited by R. Nalewajski (Springer, 1996), p. 81-172
20. K. Burke, E. K. U. Gross, in: Springer Lectures Notes in Physics, vol. 500 (1998), p. 116-146.
21. R.O. Jones, O. Gunnarsson, Rev. Mod. Phys. 61, 689 (1989).
22. L. H. Thomas, Proc. Cambridge Philos. Soc. 23, 542(1927).
23. E. Fermi, Atti Accad. Naz. Lincei, Cl. Sci. Fis. Mat. Nat. Rend. 6, 602(1927).
24. Л.Д. Ландау, Е.М Лифшиц., Квантовая механика (Нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989.

25. Л.Д. Ландау, Е.М Лифшиц., Статистическая физика. М.: Наука, 1988.

Допоміжна література

1. Н.Марч, У. Янг, С. Сампантхар, Проблема многих тел в квантовой механике, М.: «Мир», 1969.
2. O. Gunnarsson., and B. I. Lundquist, Phys. Rev. B 13, 4274 (1976).
3. V. Peuckhart, J. Phys., C 11,4945 (1978).
4. B.M. Deb and S.K. Ghosh, J. Ghem. Phys. 77, 342 (1982).
5. E. Runge and E.K.U.Gross. Phys. Rev. Lett. 52, 997 (1984).
6. E.Runge and E.K.U.Gross. Phys. Rev. Lett. 52, 997 (1989).
7. Я. Френкель, Квантовая механика, Гостехиздат, 1936.
8. A. Puente and Llorenç Serra, Phys. Rev. Lett. 83, 3266 (1999).
9. A.Goldberg, H. M. Schey, J. L. Schwartz, Am. J. Phys. V. 35. P. 177 (1967).
10. R.Car, M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 55, 2471 (1985).
11. N.L. Oliveira, E.K.U.Gross, and W. Kohn, Phys. Rev. Lett. 60, 2430 (1988).
12. K. Capelle, E.K.U.G., B. L. Györfy, Phys.Rev.Lett. 78, 3753 (1997).
13. K. Capelle, E.K.U.G., B. L. Györfy, Phys.Rev. B 58, 473 (1998).
14. A. Puzder, et al. Phys.Rev. Lett. 92, 217401 (2004).

Інформаційні ресурси в мережі Інтернет

1. <https://www.abinit.org/>
2. <https://departments.icmab.es/leem/siesta/>
3. <https://www.quantum-espresso.org/>