

ДИСЦИПЛІНА «СУЧАСНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ У ФІЗИЦІ КОНДЕНСОВАНОГО СТАНУ»

Анотація. Дисципліна «Сучасні методи моделювання у фізиці конденсованого стану» належить до переліку дисциплін вільного вибору аспіранта. Вона забезпечує особистісний і професійний розвиток аспіранта та спрямована на формування ефективного дослідника, здатного до використання сучасних методів дослідження, зокрема методів розрахунку електронної та атомної структури матеріалів. В курсі розглядаються сучасні методи розрахунку електронної та атомної структури матеріалів та відповідні пакети програм. Система знань, отримана при вивченні дисципліни «Сучасні методи моделювання у фізиці конденсованого стану» є необхідною для вільного ознайомлення з науковою літературою, використання сучасних програмних пакетів для розрахунку електронної та атомної структури матеріалів, для проведення наукових досліджень в галузі «фізики конденсованого стану».

Мета навчальної дисципліни: оволодіння аспірантами теоретичних основ сучасних методів розрахунку електронної та атомної структури матеріалів та отримання практичного досвіду роботи з відповідними сучасними програмними пакетами.

Попередні вимоги: Аспірант повинен знати: основи математичного аналізу, математичного моделювання, комп'ютерної фізики та програмних пакетів, квантової механіки, а також квантову фізику конденсованого стану.

Змістовні модулі:

- Особливості основних методів чисельного моделювання електронної структури. Електронні стани; Рівняння Хартри-Фока;
- Вибрані методи розрахунку електронної структури твердих тіл; Теорія Функціонала Густина; Метод ЛКАО - лінійна комбінація атомних орбіталей;
- Метод молекулярної динаміки та емпіричні потенціали;
- Особливості основних програм для ab initio розрахунків електронної структури.

Мова викладання: українська

Рік підготовки, шифр навчальної дисципліни: друге півріччя другого року навчання, ДВА. 02.17

Кількість кредитів: 4

Форма заключного контролю: іспит

Структура навчальної дисципліни: загальний обсяг 120 годин, у тому числі 24 години аудиторних занять (18 год. – лекційні заняття, 4 год. – практичні заняття, 2 години – консультація), 96 годин самостійної роботи.

Викладач: Плющай Інна Вячеславівна, к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедри фізики металів фізичного факультету.

Інформація про викладача: <https://metphys.knu.ua/plyushhaj-inna-vyacheslavivna/>