

**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 Густини;
- 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.

**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/>