

New Modelling methods in Condensed matter physics

Анотація: Предметом вивчення навчальної дисципліни є сучасні методи розрахунку електронної структури матеріалів та знайомство з відповідними пакетами програм; ознайомлення з методом молекулярної динаміки та Монте-Карло; методом ЛКАО (лінійної комбінації атомних орбіталей); методом теорії функціонала густини та особливості його застосування до різного типу систем тощо. Система знань, отримана при вивченні дисципліни «New Modeling methods in Condensed matter physics» 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».

Кількість кредитів: 4

Викладач: Плющай Інна Вячеславівна, доцент, канд. фіз.-мат. наук.

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; опанування деяких комп'ютерних моделей, що застосовуються при розв'язку багаточастинкових задач.

Попередні вимоги:

Аспірант повинен знати:

- основи математичного аналізу, математичного моделювання та програмування;
- основи квантової фізики;
- квантову фізику конденсованого стану.

Аспірант повинен вміти:

- вільно володіти загально вживаними термінами теорії конденсованого стану: поверхня Фермі, обмінний інтеграл, зонна структура, ефективна маса, силова матриця тощо;
- розв'язувати задачі з квантової фізики твердого тіла;
- будувати алгоритми, користуватися сучасними програмними пакетами та виконувати базові операції по роботі з файлами як у віконному так і у командному режимі.

Змістові модулі:

Тема 1. Особливості основних методів чисельного моделювання електронної структури. Їх можливості та обмеження застосування – часова та просторова шкала.

Тема 2. Електронні стани. Рівняння Хартрі-Фока.

Тема 3. Вибрані методи розрахунку електронної структури твердих тіл

Тема 4. Теорія Функціонала Густини.

Тема 5. Метод ЛКАО - лінійна комбінація атомних орбіталей.

Тема 6. Метод молекулярної динаміки та емпіричні потенціали.

Тема 7. Особливості основних програм для ab initio розрахунків електронної структури.

Мова викладання: англійська.

Місце у структурно-логічній схемі: ДВА.3.02.17 читається на другому році навчання.

Термін вивчення: дисципліна вивчається на 2 році навчання за освітньо-науковим рівнем «доктор філософії» в обсязі 120 годин, у тому числі 48 годин аудиторних занять (36 год. – лекційні заняття, 8 год. – практичні заняття, 4 години – консультація), 72 годин самостійної роботи.