

**ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»
ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ПРИКЛАДНОЇ ФІЗИКИ**

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Проректор з наукової роботи
_____ /Студеняк І.П./
« ____ » _____ 2019 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

**МЕТОДИ РОЗРАХУНКІВ ТА МОДЕЛЮВАННЯ У ФІЗИЦІ ТВЕРДОГО
ТІЛА**

Рівень вищої освіти	третій (освітньо-науковий)
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	105 Прикладна фізика і наноматеріали
Освітня програма	Прикладна фізика і наноматеріали
Статус дисципліни	вибіркова
Мова навчання	українська

Робоча програма навчальної дисципліни «Методи розрахунків та моделювання у фізиці твердого тіла» для здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії галузі знань **10 Природничі науки** спеціальності **105 Прикладна фізика і наноматеріали** освітньої програми **Прикладна фізика і наноматеріали**.

Розробники: Небола І.І., професор, доктор-фізико математичних наук, завідувач кафедри прикладної фізики

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

протокол № ____ від « ____ » _____ 2019 р.

Завідувач кафедри _____ Небола І.І.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

протокол № ____ від « ____ » _____ 2019 р.

Голова науково-методичної комісії _____ Карбованець М. І.

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Найменування показників	Розподіл годин за навчальним планом	
	Денна форма навчання	Заочна форма навчання
Кількість кредитів ЄКТС – 6	Рік підготовки:	
Загальна кількість годин – 180	1	1
Кількість модулів – 2	Семестр:	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 3 самостійної роботи студента – 12	2	2
	Лекції:	
	30	10
	Практичні (семінарські):	
	30	8
Вид підсумкового контролю: залік, екзамен	Лабораторні:	
Форма підсумкового контролю: усна	Самостійна робота:	
	120	162

2. МЕТА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Метою вивчення навчальної дисципліни є формування цілісної системи знань та навиків в області комп'ютерного моделювання фізичних процесів у твердому тілі з використанням сучасних методів розрахунку, засвоєння методики проведення комп'ютерного моделювання фізичних досліджень, а також методики розрахунку головних фізичних параметрів твердого тіла.

Основні завдання навчальної дисципліни - дати розуміння ролі комп'ютерів в сучасній фізиці, основних методів комп'ютерного моделювання та областей їх застосування, продемонструвати особливості застосування основних методів комп'ютерного моделювання в фізиці конденсованого стану та наноматеріалах, фізиці твердого тіла, дати аспірантам навички застосовування комп'ютерного моделювання в їх науково-дослідній роботі.

Відповідно до освітньо-наукової програми, вивчення дисципліни «**Методи розрахунків та моделювання у фізиці твердого тіла**» сприяє формуванню у здобувачів вищої освіти таких компетентностей:

–**соціально-особистісні компетенції**: креативність, здатність до системного мислення, адаптивність, комунікабельність, здатність до самонавчання, здатність до критичного аналізу при проведенні розрахунків і моделювання, оцінки сучасних наукових досягнень у області теоретичних розрахунків властивостей різних фаз твердого тіла; здатність до організації власної науково-дослідницької діяльності; знання змісту процесу цілеспрямованого професійного та особистісного розвитку, його особливості та способи реалізації при вирішенні професійних завдань, виходячи з етапів кар'єрного зростання і вимог ринку праці в сфері обраних наукових досліджень; вміння слідувати нормам, прийнятим в науковому спілкуванні при роботі в українських і міжнародних дослідницьких колективах з метою вирішення наукових і науково-освітніх завдань в обраній області наукових досліджень;

–**загальнонаукові компетенції**: володіння теоретико-методологічними засадами регулювання відносин інтелектуальної власності; розуміння необхідності участі у конкурсах та грантових програмах; володіти навичками аналізу основних світоглядних і методологічних проблем, в т.ч. міждисциплінарного характеру, що виникають у роботі при вирішенні наукових і науково-освітніх завдань в рамках українських або міжнародних дослідницьких проєктів;

–**інструментальні компетенції**: знання основ методології і практики організації науково-дослідної роботи; індивідуальних досліджень та ефективної командної дослідницької діяльності; здатність до письмової та усної комунікації при роботі в українських та зарубіжних наукових колективах; навички роботи з спеціалізованими комп'ютерними програмами моделювання та розрахунку параметрів твердого тіла; вміння вести пошук, підбір та опрацювання наукової інформації по тематиці досліджень;

–**професійні компетенції**: здатність виявляти актуальні наукові проблеми та знаходити оптимальні шляхи їх вирішення, виявляти причинно-наслідкові зв'язки та здійснювати теоретичний аналіз наукової проблеми; пропонувати та обговорювати гіпотези; вільно володіти професійною лексикою; подавати результати наукової діяльності в усній і письмовій формі при роботі в українських і міжнародних дослідницьких колективах в обраній області наукових досліджень; усно представляти наукові результати на українських та міжнародних фахових конференціях та в письмовій формі подавати до опублікування в українських та міжнародних фахових виданнях.

3. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Відповідно до освітньо-наукової програми, вивчення навчальної дисципліни «**Методи розрахунків та моделювання у фізиці твердого тіла**» повинно забезпечити досягнення здобувачами вищої освіти таких програмних результатів навчання (ПРН):

Програмні результати навчання	Шифр ПРН
Знати сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі фізики, прикладної фізики та суміжних галузей знань.	ПРН 1.1.
Знати фундаментальні праці провідних зарубіжних вчених та наукових шкіл України у галузі дослідження.	ПРН 1.2.

Вміти формулювати загальну методологічну базу власного наукового дослідження.	ПРН 2.2.
Вміти проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, які приводять до отримання нових знань.	ПРН 2.3.
Вміти формулювати наукову проблему з огляду на стан її наукової розробки та сучасні наукові тенденції.	ПРН 2.5.
Вміти формулювати робочі гіпотези та моделі досліджуваної проблеми.	ПРН 2.6.
Вміти аналізувати наукові праці в галузі прикладної фізики, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання.	ПРН 2.7.

Очікувані результати навчання, які повинні бути досягнуті здобувачами освіти після опанування навчальної дисципліни «**Методи розрахунків та моделювання у фізиці твердого тіла**» :

Очікувані результати навчання з дисципліни	Шифр ПРН
Знати основну термінологію в області теорії твердого тіла та комп'ютерного моделювання фізичних властивостей.	ПРН 1.1.
Знати фізичні принципи основних методів дослідження і розрахунку фізичних процесів.	ПРН 1.1
Знати мікроскопічні моделі дослідження енергетичних одночастинкових спектрів у твердих тілах і наноматеріалах.	ПРН 1.2
Вміти планувати проведення розрахункових робіт по дослідженню різних типів фізичних властивостей твердих тіл і наноматеріалах.	ПРН 2.2
Вміти розраховувати параметри різних фізичних властивостей твердих тіл, проводити їх аналіз і порівняння з експериментальними вимірюваннями.	ПРН 2.3
Володіти методами побудови моделей, що описують фізичні властивості в твердому тілі.	ПРН 2.5
Вміти генерувати нові ідеї при вирішенні дослідницьких і практичних задач в комп'ютерного моделювання.	ПРН 2.6
Вміти застосовувати фізичні теорії для опису та проведення розрахунків та моделювання в різних твердо тільних матеріалах.	ПРН 2.6
Вміти аналізувати наукову літературу по методах розрахунку властивостей твердих тіл та їх моделюванню;	ПРН 2.7

4. 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:

- поточний контроль успішності,
- модульний контроль,
- підсумковий контроль.

Форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання

Форми поточного контролю:

- вибіркоче усне опитування;
- фронтальне стандартизоване усне та/або письмове опитування за основними питаннями теми заняття;
- експрес-опитування;

- тестування;
- реферативні повідомлення та їх обговорення;
- перевірка якості виконання завдань для самостійної роботи, зокрема за конспектами матеріалів;
- оцінювання якості та повноти виконання завдань модульної контрольної роботи.

Форма модульного контролю: виконання модульної контрольної роботи, результати якої оцінюються за 100-бальною шкалою за кожний модуль.

Форми підсумкового семестрового контролю: залік, екзамен. До заліку або екзамену допускаються аспіранти, які відпрацювали пропущені заняття і виконали модульні контрольні роботи.

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

Поточне оцінювання та самостійна робота				Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4	70	100
5	10	10	5		

T1, T2, T3, T4 – теми

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

Поточне оцінювання та самостійна робота				Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4	70	100
10	10	5	5		

T1, T2, T3, T4 – теми

Оцінювання окремих видів навчальної роботи з дисципліни

Вид діяльності здобувача вищої освіти	Модуль 1		Модуль 2	
	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)
Практичні (семінарські) заняття	7	30	8	30
Лабораторні заняття (допуск, виконання та захист)		-		
Комп'ютерне тестування при тематичному оцінюванні		-		
Письмове тестування при тематичному оцінюванні				
Презентація		-		
Реферат		-		
Есе		-		
Модульна контрольна робота		70		70
Разом	7	100	8	100

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи

Модульна контрольна робота проводиться 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 **«Методи розрахунків та моделювання у фізиці твердого тіла»** : 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;

- "незараховано" - 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.

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

Оцінка „відмінно” (А; 90-100) 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” (В, С; 74-89) 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” (D, E; 60-73) 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” (FX, F; 1-59) 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 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
90-100	зараховано	A	відмінно
82-89		B	добре
74-81		C	добре
64-73		D	задовільно
60-64		E	задовільно
35-59	незараховано	FX	незадовільно з можливістю перескладання
1-34		F	незадовільно з обов'язковим повторним навчанням

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

Результати підсумкового контролю знань вносяться до відомості обліку успішності.

5. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

5.1. Зміст навчальної дисципліни

Модуль I. Основні сучасні методи розрахунку та моделювання фізичних властивостей

Тема 1. Роль комп'ютерів у фізиці.

Області застосування комп'ютерів у фізиці: комп'ютерне моделювання (експеримент), чисельний аналіз, автоматизація фізичного експерименту аналітичні обчислення і інші застосування комп'ютерів (бази даних, Інтернет та ін.).

Стохастичні й детерміновані методи моделювання. Основні методи комп'ютерного розрахунку і моделювання: метод молекулярної динаміки (МД), метод Монте-Карло (МК) або статистичних випробувань, кінетична метод (КМ).

Коротка історія розвитку комп'ютерного моделювання.

Тема 2. Метод Монте-Карло для моделювання багато частикових систем

Застосування методу Монте-Карло для чисельного інтегрування. Рівномірний і нерівномірний розподіл випадкового числа. Випадкове блукання. Алгоритми отримання заданого розподілу. Метод Метрополі, отримання заданого розподілу.

Статистичні ансамблі. Метод МК для канонічного ансамблю. Моделювання одновимірної і двовимірної моделей Ізінга.

Метод МК для канонічного ансамблю. Моделювання одновимірної, двовимірної і тривимірної моделей Ізінга.

Метод МК для канонічного ансамблю. Моделювання одновимірної, двовимірної і тривимірної моделей Ізінга. Реалізація алгоритму Метрополі. Критичні індекси. Вплив розмірів системи, що моделюється на критичні властивості. Метод МК для ансамблю з постійними температурою і тиском.

Тема 3. Метод класичної молекулярної динаміки (МД).

Рівняння руху в методі МД. Сили і потенціали міжатомної взаємодії. Парні потенціали: Леннарда-Джонса, Морзе та ін. Багаточастинкові потенціали: модель зануреного атома, потенціал Стіл-Лінджері-Вебера, потенціал Саттон-Чена, ЕАМ, МЕАМ і ін. Обрізання потенціалу.

Граничні умови. Завдання початкових положень і швидкостей частинок. Інтегрування рівнянь руху. Вибір кроку в методі МД. Розрахунок термодинамічних величин. Чисельні алгоритми методу МД і його комп'ютерна реалізація. Програми, що реалізують метод МД.

Тема 4. Метод першопринципної МД.

Квантовий метод Монте-Карло для багато електронних систем. Чисельні алгоритми і комп'ютерні програми, що реалізують розрахункові методи зонної і кластерної моделі.

Модуль II. Комп'ютерне моделювання у фізиці твердого тіла

Тема 1. Комп'ютерне моделювання електронної структури твердих тіл.

Зонна і кластерна модель електронної структури. теорія функціоналу щільності. Методи розрахунку електронної структури. Метод першопринципної МД. Квантовий метод Монте-Карло для багато електронних систем. Чисельні алгоритми і комп'ютерні програми, що реалізують розрахункові методи зонної і кластерної моделі.

Тема 2. Застосування методів комп'ютерного експерименту до моделювання.

Моделювання між вузельних атомів і вакансій в твердих тілах методами класичної і першопринципної МД. Моделювання домішок в твердих тілах: домішки впровадження, домішки заміщення, комплекси домішок і вакансій, комплекси домішкових і між вузлових атомів.

Тема 3. Моделювання та розрахунок спектрів одночастинкових збудження в твердих тілах.

Чисельні алгоритми і комп'ютерні програми для моделювання фононних та електронних спектрів складних кристалів. Застосування методів теоретико-групаового аналізу для корекції чисельних розрахунків енергетичних залежностей. Оптимізація комп'ютерного розрахунку з врахуванням експериментальних даних.

Тема 4. Моделювання структури та властивостей низько розмірних систем.

Побудова атомних моделей нанотрубок (НТ). Застосування методів комп'ютерного моделювання для оптимізації структури НТ. Моделювання механічних властивостей НТ методами МД і квантової хімії. Моделювання електронної структури НТ. Моделювання структури та властивостей двовимірних структур Побудова атомних моделей поверхні, міжфазних кордонів і графена. Застосування методів комп'ютерного моделювання для дослідження властивостей квазидвохмірних структур. Моделювання структури фулероноподібних частинок. Побудова атомних моделей фулеренів. Застосування методів комп'ютерного моделювання для оптимізації структури фулероноподібних частинок.

5.2. Структура навчальної дисципліни

Денна форма навчання

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 І. Основні сучасні методи розрахунку та моделювання фізичних властивостей						
Тема 1. Роль комп'ютерів у фізиці.	22	2	2			18
Тема 2. Метод Монте-Карло для моделювання багаточасткових систем.	22	4	4			14
Тема 3. Метод класичної молекулярної динаміки (МД).	24	6	4			14
Тема 4. Метод першопринципної МД.	22	4	4			14
Модульна контрольна робота	2					
Разом за модуль	90	16	14			60
2-й семестр						
Модуль 2. Комп'ютерне моделювання у фізиці твердого тіла						
Тема 1. Комп'ютерне моделювання електронної структури твердих тіл.	22	4	4			14
Тема 2. Застосування методів комп'ютерного експерименту до моделювання.	24	4	4			16
Тема 3. Моделювання та розрахунок спектрів одночастинкових збудження в твердих тілах.	22	4	4			14
Моделювання структури та властивостей низько розмірних систем.	22	2	4			16
Модульна контрольна робота	2					
Разом за модуль	90	14	16			60
Разом за семестр	180	30	30			120

Заочна форма навчання

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Форма навчання: денна					
	Усього	у тому числі				
Лекції		практичні (семінарські)	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота	

		Лекції	практичні (семінарські)	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота
1-й семестр						
Модуль І. Основні сучасні методи розрахунку та моделювання фізичних властивостей						
Тема 1. Роль комп'ютерів у фізиці.	22	1				21
Тема 2. Метод Монте-Карло для моделювання багаточасткових систем.	22	2	2			18
Тема 3. Метод класичної молекулярної динаміки (МД).	24	2	2			20
Тема 4. Метод першопринципної МД.	22	1				21
Модульна контрольна робота	2					
Разом за модуль	90	6	4			80
2-й семестр						
Модуль 2. Комп'ютерне моделювання у фізиці твердого тіла						
Тема 1. Комп'ютерне моделювання електронної структури твердих тіл.	22	1	2			19
Тема 2. Застосування методів комп'ютерного експерименту до моделювання.	24	1	2			21
Тема 3. Моделювання та розрахунок спектрів одночастинкових збудження в твердих тілах.	22	1				21
Тема 4. Моделювання структури та властивостей низько розмірних систем.	22	1				21
Модульна контрольна робота	2					
Разом за модуль	90	4	4			82
Разом за семестр	180	10	8			162

5.3. Теми практичних (семінарських, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денна	заочна
1.	Моделювання і аналіз кристалічної структури складних сполук з використанням оболочки CaRine.	4	2
2.	Знаходження позицій атомів, орбіт і їх виродження з використанням оболочки CaRine.	2	
3.	Розрахунок коефіцієнта проходження крізь потенціальний бар'єр прозорого і квазікласичного бар'єра.	4	2
4.	Дослідження розсіювання на кристалічній ґратці в стаціонарній квантовій механіці. Формалізм трансфер-матриці.	2	
5.	Розрахунок дисперсії фононного спектру в середовищі MAPLE.	4	2
6.	Моделювання двовимірного електронного газу у схрещених електричному і магнітному полях.	2	
7.	Розрахунок електронного спектру в наближенні пустої ґратки.	2	

8.	Розрахунок енергетичної структури германію в методі електронної щільності. Моделювання псевдо потенціалів.	4	
9.	Розрахунок мілких домішкових станів в гетеро структурах.	4	2
10.	Моделювання резонансних та тунельних явищ у квантово-розмірних системах.	2	
Разом		30	8

5.4. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денна	заочна
1.	Моделювання і аналіз кристалічної структури з використанням оболочки CaRine.	6	8
2.	Знаходження позицій атомів, орбіт і їх виродження об'єкту дисертаційного дослідження з використанням оболочки CaRine.	6	10
3.	Одновимірна потенціальна яма. Стани з дискретним спектром.	6	8
4.	Стани з неперервним спектром. Віртуальні рівні енергії.	6	8
5.	Експериментальні та розрахункові методи дослідження розупорядкованих систем.	6	8
6.	Моделювання класичних і квантово розмірних ефектів у кристалах.	8	10
7.	Розрахунок дисперсії фононного спектру складних кристалів в середовищі MAPLE.	8	10
8.	Моделювання двовимірного електронного газу у схрещених електричному і магнітному полях.	8	10
9.	Розрахунок електронного спектру в наближенні пустої ґратки.	6	10
10.	Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера за допомогою детермінанта Слетера.	8	10
11.	Розрахунок енергетичної структури германію в методі електронної щільності.	8	10
12.	Моделювання псевдо потенціалів.	6	8
13.	Розрахунок мілких домішкових станів в гетеро структурах.	6	8
14.	Моделювання резонансних явищ у квантово-розмірних системах.	6	8
15.	Моделювання тунельних явищ у квантово-розмірних системах.	8	10
16.	Модель Шоклі-Андерсона. Розрахунок і аналіз поодиноких гетеропереходів.	6	8
17.	Розрахунок енергетичної структури гетеропереходів в електричному полі.	6	8
18.	Розрахунок електронного спектра наночастинок в методі «конфігурації».	6	8
Разом		120	162

6. ІНСТРУМЕНТИ, ОБЛАДНАННЯ ТА ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ, ВИКОРИСТАННЯ ЯКИХ ПЕРЕДБАЧАЄ НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА

Технічні засоби: Мультимедійний проектор.

Обладнання: персональні комп'ютери, ноутбуки.

Програмне забезпечення Windows 10, Microsoft Power Point, MAPLE.

7. РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА ІНФОРМАЦІЇ

Основна література

1. Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х томах) / Х. Гулд, Я. Тобочник. М.: «Мир», 1990. -350 с., 400 с.
2. Малютин, В.М. Компьютерное моделирование физических явлений: Учебное пособие / В.М. Малютин, ЕА. Склярова. – Томск: Изд-во ТПУ, 2004. – 156 с. ISBN.
3. Хеерман, Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / Д.В. Хеерман. М.: «Мир», 1990. –176 с.
4. Биндер, К. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике / К. Биндер, Д. В. Хеерман. – М.: Наука. Физматлит, 1995. – 144 с.– (Компьютеры в физике). — ISBN 5-02-014735-4.
5. Кунин, С. Вычислительная физика / С. Кунин.–М.: «Мир», 1992. -518 с.
6. Сатанин, А.М. Введение в теорию функционала плотности. Учебно-методическое пособие / А.М. Сатанин. Нижний Новгород, 2009, 64 с.
7. Немошкаленко, В.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Зонная теория металлов / В.В. Немошкаленко, В.Н. Антонов. К.: Наук. думка, 1985, 408 с.
8. Немошкаленко, В.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронные состояния в неидеальных кристаллах / В.В. Немошкаленко, Ю.Н. Кучеренко К.: Наук. думка., 1986. –296 с.
9. Венгер, Є.Ф. Збірник задач з квантової механіки./Є.Ф.Венгер, В.М.Грибань, О.В.Мельникаук. – К.: Вища школа, 2003. – 230 с.
10. Дорожкин, Н. Н. Компьютерное моделирование в физике твердого тела: лаб. практикум для студентов физ. фак. / Н. Н. Дорожкин, Н. Г. Якутович. Минск: БГУ, 2010. 107 с. ISBN 978-985-518-330-4.
11. Мазуренко, В.В. Моделирование физических свойств наноматериалов на базе параллельных алгоритмов: учебное пособие / В.В. Мазуренко, А.Н. Руденко, В.Г. Мазуренко. – Екатеринбург, 2009. – 77 с. ISBN.
12. Кашурников, В.А. Вычислительные методы в квантовой физике: учебное пособие / В.А. Кашурников, А.В. Красавин М.: МИФИ, 2005. – 412 с.
13. Ивановский, А.Л. Квантовая химия в материаловедении. Нанотубулярные формы вещества. / А.Л. Ивановский. Изд-во УрО РАН, Екатеринбург, 1999, 176 с.
14. Ивановская, А.Л. О некоторых направлениях компьютерного материаловедения неорганических наноструктур / В.В. Ивановская, А.Л. Ивановский // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. –2009. –т. 1. –№ 1. с. 7–24.
15. Сорокин, П. Б. Теоретические исследования физико-химических свойств низкоразмерных структур, Москва, 2014. – 324.
16. Еремин Н.Н., Урусов В.С.// «Компьютерное моделирование структуры и свойств кристаллов – современные достижения и возможности» // В сб. «Проблемы кристаллологии» стр. 228–266, М.: ГЕОС, 1999.

Еремин Н.Н., Урусов В.С.// «Компьютерное моделирование структуры и свойств кристаллов – современные достижения и возможности» // В сб. «Проблемы кристаллологии» стр. 228–266, М.: ГЕОС, 1999 6 Смирнова Т.П., Каичев В.В., Яковкина Л.В. и др.// «Химическое строение пленок оксида гафния на кремнии», Неорганические материалы.. Т.44, №9.- С.965-970, 2008 7 Урусов В.С., Еремин Н.Н.// «Компьютерное моделирование структур и свойств кристаллов - современные достижения и возможности», Вестник МГУ, серия Геология, 2004 8 Урусов В.С., Еремин Н.Н.// «Кристаллохимия. Краткий курс», Изд. Московского университета, 2010 9 Урусов В.С. // «Теория изоморфной смесимости», М. Наука, 1977 10 Урусов В.С. // «Энергетическая кристаллохимия», М.: Наука, 1975