

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут фізики конденсованих систем НАН України

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Гарант освітньої програми

«Фізика та астрономія»

_____ Т.М. Брик
“ ” _____ 2016.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ВБ2.8. *“Моделювання методами першопринципної молекулярної динаміки”*

III рівень вищої освіти – освітньо-науковий

галузь знань	<u>10 Природничі науки</u>
спеціальність	<u>104 Фізика та астрономія</u>
спеціалізація	комп'ютерне моделювання фізико-хімічних процесів
вид дисципліни	<u>вільного вибору</u>
мова викладання	<u>українська</u>

Львів – 2017 рік

Робоча програма з навчальної дисципліни *«Першопринципне моделювання багаточастинкових систем»* для здобувачів III освітньо-наукового рівня підготовки

Розробник:

Завідувач відділу КМБС,
доктор фізико-математичних наук,
ст. наук. співр.

Т. М. Брик

Робоча програма розглянута та схвалена на засіданні Вченої ради ІФКС НАН України

Протокол від «31» травня 2017 року № 3

Вчений секретар ІФКС НАН України
кандидат фізико-математичних наук

Р.С. Мельник

1. Структура навчальної дисципліни

Найменування показників	Всього годин
	Денна форма
Кількість кредитів/год.	3/90
Усього годин аудиторної роботи, у т.ч.:	48
• лекційні заняття, год.	16
• семінарські заняття, год.	16
• практичні заняття, год.	16
• лабораторні заняття, год.	-
Усього годин самостійної роботи, у т.ч.:	42
• контрольні роботи, к-сть/год.	-
• розрахункові (розрахунково-графічні), к-сть/год.	-
• індивідуальне науково-дослідне завдання, к-сть/год.	18
• підготовка до навчальних занять та контрольних заходів, год.	24
Екзамени	1
Заліки	-

Частка аудиторного навчального часу студента у відсотковому вимірі – 53.3%

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

2.1. Мета вивчення навчальної дисципліни – опанувати теоретичні та практичні основи методики розрахунків електронної структури твердих тіл та неупорядкованих систем. Практичне застосування методів в рамках функціоналу густини дозволить моделювати електронні процеси на одно- та багатопроцесорних комп'ютерах на мікроскопічному рівні, що необхідно для пояснення процесів у нанofізичі та в багатьох інших важливих напрямках сучасної науки, таких як біотехнологія, біофізика, атмосферна фізика. Практичне застосування методів псевдопотенціалів, та першопринципного комп'ютерного моделювання в рамках функціоналу густини дозволить моделювати процеси утворення хімічного зв'язку, утворення рівноважних структур з перших принципів, електронні процеси переносу.

2.2. Завдання навчальної дисципліни

Внаслідок вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен бути здатним продемонструвати такі **результати навчання** :

1. Знати принципові відмінності та межі застосування методів квантового Монте-Карло та першопринципної молекулярної динаміки.
2. Знати основні алгоритми першопринципного моделювання.
3. Знати основні концептуальні підходи до застосовності функціоналу електронної густини та застосовності цього підходу в комп'ютерному моделюванні з перших принципів.
4. Вміти розробляти комп'ютерні програми для обчислень електронних властивостей систем в різних агрегатних станах.

Вивчення навчальної дисципліни передбачає формування у докторантів необхідних компетентностей:

Загальні компетентності:

- 1) глибинні знання сучасних представлень в галузі моделювання, фізики та практичного застосування результатів першопринципного моделювання;
- 2) критичний аналіз, оцінка і синтез нових ідей в галузі першопринципного комп'ютерного моделювання;
- 3) уміння ефективно спілкуватися з широкою науковою спільнотою з актуальних питань розрахунку електронної структури;
- 4) уміння практичного застосування принципів і концепцій сучасного першопринципного комп'ютерного моделювання;
- 5) ініціювання оригінальних дослідницько-інноваційних проектів галузі фізики і фізичної хімії.

Фахові компетентності:

- 1) знання про сучасні тенденції розвитку і найбільш важливі нові наукові досягнення в області статистичної фізики, електронної теорії хімічного зв'язку, а також суміжних областях;
- 2) систематичні знання і розуміння сучасних наукових теорій і методів, та
- 3) вміння їх ефективно застосовувати для виконання комп'ютерного моделювання на атомістичному рівні;
- 4) здатність ефективно застосовувати методи аналізу, математичне моделювання, виконувати фізичні та математичні експерименти при проведенні наукових досліджень в галузі статистичної фізики та фізики твердого тіла;
- 5) здатність інтегрувати знання з інших дисциплін, застосовувати системний
- 6) підхід та враховувати нетехнічні аспекти при моделюванні складних молекулярних систем.

Результати навчання даної дисципліни деталізують такі **програмні результати навчання** :

Знання (ЗН) :

- 1) здатність продемонструвати систематичні знання сучасних методів проведення досліджень в області першопринципного комп'ютерного моделювання та електронної структури складних систем;
- 2) здатність продемонструвати поглиблені знання при наукових дослідженнях у галузі фізики електронних властивостей систем у різних агрегатних станах;
- 3) здатність продемонструвати вплив першопринципного комп'ютерного моделювання на розуміння мікроскопічних процесів, які визначають макроскопічні властивості складних фізичних систем та фізико-хімічних процесів.

Уміння (УМ):

- 1) здійснювати пошук, аналізувати і критично оцінювати інформацію в галузі першопринципного комп'ютерного моделювання з різних джерел;
- 2) застосовувати знання і розуміння для розв'язування задач взаємозв'язку електронних, структурних та динамічних властивостей;
- 3) досліджувати і моделювати явища та процеси різної складності при вирішенні задач прикладної фізики за допомогою підходів першопринципного комп'ютерного моделювання;
- 4) застосовувати системний підхід, інтегруючи знання з інших дисциплін та враховуючи міждисциплінарні аспекти під час проведення першопринципного комп'ютерного моделювання;
- 5) поєднувати теорію і практику, а також приймати рішення та виробляти стратегію розв'язання науково-прикладних задач з урахуванням загальнолюдських цінностей, суспільних, державних та виробничих інтересів;
- 6) ефективно працювати як індивідуально, так і у складі команди;
- 7) самостійно виконувати експериментальні дослідження та застосовувати дослідницькі навички.

Комунікація(КОМ):

- 1) уміння ефективно спілкуватись на професійному та соціальному рівнях;
- 2) уміння представляти та обговорювати отримані результати та здійснювати трансфер набутих знань з фізики електронних властивостей складних систем;

Автономія і відповідальність (АіВ):

- 1) здатність самостійно проводити наукові дослідження у галузі першопринципного комп'ютерного моделювання і приймати рішення;
- 2) здатність усвідомлювати необхідність навчання впродовж усього життя з метою поглиблення набутих та здобуття нових фахових знань з фізики електронних властивостей в комбінації з першопринципним комп'ютерним моделюванням.

2.3. Перелік попередніх та супутних і наступних навчальних дисциплін

№ п/п	Попередні навчальні дисципліни	Супутні і наступні навчальні дисципліни
1.	Комп'ютерне моделювання фізичних процесів	Основи фізики рідкого стану
2.	Фізика м'якої речовини	Методи квантової хімії

3. Анотація навчальної дисципліни

Курс методик розрахунку в рамках теорії функціоналу густини можна умовно розділити на дві частини. В першій частині планується детальне вивчення методу функціоналу густини та алгоритмів розрахунку електронних спектрів в рамках цього формалізму. Важливим розділом тут є детальне вивчення електрон-іонних псевдопотенціалів та методів їх генерування. Псевдопотенціали як вхідні взаємодії є основою для подальшого розуміння методу першопринципної молекулярної динаміки, який розглядеться в другій частині курсу. Аспіранти будуть мати нагоду ознайомитись з найбільш популярними сучасними методиками першопринципного моделювання на основі методу Кар-Паррінелло та методу мінімізації електронних ступенів вільності. Практичні вміння роботи з пакетами програм для першопринципного моделювання повинні закріпити теоретичний матеріал..

4. Опис навчальної дисципліни

4.1. Лекційні заняття

№ п/п	Назви тем	К-сть годин
1	Формалізм функціоналу електронної густини та псевдопотенціали Поняття адиабатичності для електронних станів. Функціонал електронної густини. Рівняння Кона-Шема. Поняття обмінно-кореляційного потенціалу. Межі застосовності теорії функціоналу електронної густини. Локальне та градієнтне наближення функціоналу густини.	4
2	Ефективні електрон-іонні взаємодії для першопринципної динаміки Поняття псевдопотенціалу. Модельні та першопринципні псевдопотенціали. Зберігаючі норму псевдопотенціали. Генерування зберігаючих норму псевдопотенціалів. Ультрам'які псевдопотенціали Вандербільта. PAW-потенціали. Існуючі бібліотеки псевдопотенціалів.	4
3.	Першопринципне моделювання молекулярної динаміки Основні принципи першопринципного моделювання. Сили Гелмана-Фейнмана. Метод Кар-Паррінелло. Фіктивна динаміка електронних ступенів вільності. Ансамблі у першопринципній молекулярній динаміці. Молекулярна динаміка методом мінімізації енергії на поверхні Борна-Опенгеймера. Алгоритми спряжених градієнтів та прямої мінімізації залишку.	4
4.	Розрахунок властивостей систем з першопринципного моделювання молекулярної динаміки Електрон-іонні функції розподілу та структурні фактори. Оптична провідність. Теплопровідність. Розрахунки поляризованості неметалічних систем. Розрахунки високочастотних внесків у діелектричну проникність систем.	4
Усього годин		16

4.2. Практичні заняття

№ теми	Назви тем	Кількість годин
1	Побудова та розрахунок ефективних взаємодій для використання їх у комп'ютерному моделюванні	8

2	Мікроскопічні моделі динамічних процесів у конденсованих системах	8
Усього годин		16

4.3. Семінарські заняття

№ теми	Назви тем	Кількість годин
1	Вибір алгоритмів для моделювання методом молекулярної динаміки .	4
2	Розрахунок та аналіз часових кореляційних функцій	4
3	Генерування зберігаючих норму псевдопотенціалів	4
4	Використання функцій Ваньє для аналізу хімічних зв'язків у першопринципній молекулярній динаміці	4
Усього годин		16

4.4. Самостійна робота

№	Найменування робіт	кількість год.
1.	Індивідуальне науково-дослідне завдання (тематичні презентаційні доповіді)	18
2.	Підготовка до навчальних занять та контрольних заходів	24
Усього годин		42

5. Методи діагностики знань

Екзамен, поточний контроль (захист індивідуального науково-дослідного завдання, активність на практичних і семінарських заняттях).

6. Критерії оцінювання результатів навчання студентів

Максимальна оцінка в балах						
Поточний контроль				Екзаменаційний контроль		Разом за дисципліну
Лабораторні заняття	Практичні і семінарські заняття	Самостійна робота	Разом балів (ПК)	Письмова компонента	Усна компонента	
-	10	10	20	-	80	100

7. Навчально-методичне забезпечення

Використання віртуального навчального середовища Інституту фізики конденсованих систем та авторських розробок науково-педагогічних працівників.

8. Рекомендована література

Базова

1. R. G. Parr, W. Yang. *Density-functional theory of atoms and molecules*. Oxford University Press, Oxford, 1989
2. У. Харрисон. *Електронная структура и свойства твердых тел*. “Мир”, Москва, 1983
3. А.М. Сатанин. *Введение в теорию функционала плотности*. Издательство Нижегородского университета, Нижний Новгород, 2009
4. Н.Марч, В.Кон, П. Вашишта. *Теория неоднородного электронного газа*. “Мир”, Москва, 1987

Допоміжна

1. D.Frenkel, B.Smit. *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press. SanDiego,1996
- 2.

9. Інформаційні ресурси

Віртуальне навчальне середовище Інституту фізики конденсованих систем, авторські розробки та наукові статті науково-педагогічних працівників, бібліотечний фонд Інституту фізики конденсованих систем НАН України

10. Узгодження з іншими навчальними дисциплінами

№ п/п	Назва дисципліни	Прізвище та ініціали викладача	Підпис
1.	Комп'ютерне моделювання фізичних процесів	Ільницький Я. М.	

2.	Методи квантової хімії	Брик Т.М.	
----	------------------------	-----------	--

11. Зміни та доповнення до робочої програми навчальної дисципліни

№ з/п	Зміст внесених змін (доповнень)	Дата і № протоколу засідання Вченої ради	Примітки
1			
...			
N			