

АНОТАЦІЯ ДИСЦИПЛІНИ

«Першопринципні розрахунки енергетичного спектру кристалів та гетероструктур»

Рівень вищої освіти	Другий (магістерський)
Курс (рік) навчання	1
Семестр	1-2
Обсяг дисципліни у кредитах	4
Мова викладання	Українська
Передумови для вивчення дисципліни	
Кафедра, яка забезпечує викладання дисципліни	Кафедра фізики напівпровідників
Інформаційне забезпечення	Навчально-методичний комплекс дисципліни на сайті електронного навчання УжНУ
Форма проведення занять	Лекції, лабораторні (практичні) роботи
Форма семестрового контролю	Залік

Ключові результати навчання (знання, уміння та інші компетентності):

Здатність ефективно вибрати метод квантової хімії та молекулярної механіки для того, щоб розрахувати фізичні параметри кристалу (гетероструктури) та порівняти результати з експериментальними даними. Також він має вміти за потреби змінити метод розрахунку в залежності від фізичних властивостей досліджуваного об'єкту та звертаючи увагу на якість результатів розрахунків і аналіз цих результатів..

Короткий зміст дисципліни (що буде вивчатися, перелік тем):

- Тема 1. Вступ. Задачі та мета курсу. Моделювання фізичних властивостей за допомогою ЕОМ.
- Тема 2. Багатоелектронні системи. Наближення невзаємодіючих електронів. Наближення Хартрі-Фока. Обмін і кореляція.
- Тема 3. Проблема обчислення багатоелектронної хвильової функції. Системи з кількома ступенями вільності: молекула водню. Точність апроксимації для багатоелектронних систем. Катастрофа Ван Флека. Вихід з «експоненційної ями»
- Тема 4. Метод функціоналу електронної густини. Метод Томаса-Фермі: приклад функціоналу густини. Теореми Кона-Хохенберга. Скінчені температури: теорія Мерміна. Узагальнення на інші системи.
- Тема 5. Рівняння Кона-Шема (Kohn-Sham ansatz). Модельна (допоміжна) система. Варіаційний принцип Кона-Хохенберга. Рівняння Кона-Шема. Обмінно-кореляційна енергія. Метод розв'язання рівняння Кона-Шема. Приклади розрахунків за методом Кона-Шема
- Тема 6. Часові ефекти в методі функціоналу густини (TDDFT). Варіаційний принцип Френкеля. Функціонал густини для нестационарних систем. Приклад розв'язання нестационарного рівняння Кона-Шема
- Тема 7. Застосування метода функціонала густини до різних конденсованих систем. Особливості застосування методу в залежності від розмірності електронного газу (квантові точки, дроти, гетероструктури). Функціонал спінової густини. Функціонал густини в теорії надпровідності. Квантова молекулярна динаміка.