

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет

Кафедра фізики металів

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Декан фізичного факультету



2018 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

New Modeling methods in Condensed matter physics

для аспірантів

галузь знань 10 Природничі науки

(шифр і назва)

спеціальність 104 Фізика та астрономія

(шифр і назва спеціальності)

освітній рівень доктор філософії

(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)

освітня програма Фізика та астрономія

(назва освітньої програми)

вид дисципліни вибіркова

Форма навчання

очна

Навчальний рік

2018 /2019

Семестр

2

Кількість кредитів ECTS

4

Мова викладання, навчання
та оцінювання

українська

Форма заключного контролю

іспит

Викладачі: доцент Плющай Інна Вячеславівна

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 2019/2020 н.р. _____ (Оліх О.Я.) «10»_05_.2019 р. №21
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ («__»__ 20__р.
(підпис, ПІБ, дата)
(підпис, ПІБ, дата)

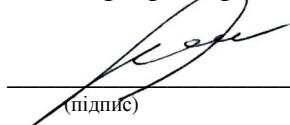
КИЇВ – 2018

Розробники: Плющай Інна Вячеславівна кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
доцент кафедри фізики металів

(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Зав. кафедри фізики металів


(підпис)

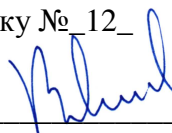
(Макара В.А.)
(прізвище та ініціали)

Протокол від «16» __03__ 2018 р. за № 9

Схвалено науково - методичною комісією фізичного факультету

Протокол від «_16_» __04__ 2018 року № 12

Голова науково-методичної комісії _____



(Зеленський С.С.)

(підпис)

(прізвище та ініціали)

ВСТУП

1. Мета 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.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основи математичного аналізу, математичного моделювання, комп'ютерної фізики та програмних пакетів, квантової механіки, а також квантову фізику конденсованого стану.
2. Вміти застосовувати попередні знання з курсів математичного аналізу, математичного моделювання, комп'ютерної фізики та програмних пакетів, квантової механіки, 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;
3. Володіти елементарними навичками математичних перетворень, побудови алгоритмів, програмування, опису квантових систем; вільно володіти загально вживаними термінами теорії конденсованого стану: поверхня Фермі, обмінний інтеграл, зонна структура, ефективна маса, силова матриця тощо.

3. Анотація навчальної дисципліни / референс:

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».

4. Завдання (навчальні цілі) – оволодіння методами і принципами деяких спеціальних методів програмування та моделювання у фізиці конденсованого стану, які є необхідними для вільного ознайомлення з науковою літературою, використання сучасних програмних пакетів для розрахунку електронної та атомної структури матеріалів, при проведенні наукових досліджень.

Згідно вимог проекту Стандарту вищої освіти України (третьій рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 104 «Фізика та астрономія», ОНП «Фізика та астрономія» дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних **компетентностей**:

Інтегральних:

Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної та/або дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики.

Загальних:

- Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
- Навички використання новітніх інформаційних і комунікаційних технологій.
- Здатність до пошуку, оброблення на аналізі інформації з різних джерел.
- Здатність генерувати нові ідеї та застосовувати знання у практичних ситуаціях.
- Здатність до проведення самостійних досліджень на сучасному рівні.
- Вміння виявляти, ставити та вирішувати проблеми.
- Здатність працювати в міжнародному науковому просторі.
- Здатність використовувати професійно-профільовані знання в галузі фізики.
- Здатність використовувати основні методи програмування та моделювання у фізиці.

Фахових:

- Здатність виконувати обчислювальні експерименти, використовувати чисельні методи для розв'язування фізичних та астрономічних задач і моделювання фізичних систем.
- Здатність використовувати знання й уміння в галузі практичного використання комп'ютерних технологій для дослідження низькорозмірних систем.
- Здатність до пошуку, обробки та аналізу інформації, розробка і впровадження інформаційних систем, використання сучасних програмних пакетів для розрахунку електронної та атомної структури матеріалів.

5. Результати навчання за дисципліною: (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

<i>Результат навчання</i> (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність*)		<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
Код	Результат навчання			
1.1	Знати перелік основних методів числового моделювання в фізиці твердого тіла; їх можливості та обмеження застосування – часова та просторова шкала; основні поняття електронної теорії твердого тіла: поверхня Фермі, самоузгоджене поле, теорема Блоха, квазіхвильовий вектор, зонна структура, густина електронних станів тощо; методи розрахунку електронної структури починаючи від наближення майже вільних та сильно зв'язаних електронів та закінчуючи сучасними методами електронних розрахунків; перелік відповідних сучасних програмних пакетів - GAUSSIAN , ABINIT, VASP, GAMESS та інші; основні положення Теорії Функціонала Густина; основи методу молекулярної динаміки та особливості його застосування до задач фізики твердого тіла; перелік емпіричних потенціалів, що використовуються при МД моделюванні та критерії їх вибору.;	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, іспит</i>	40
2.1	Вміти: вільно володіти загально вживаними термінами теорії твердого тіла: зонна структура, поверхня Фермі, функціонал густини, обмінний інтеграл, псевдопотенціал, метод молекулярної динаміки, парний потенціал, багаточастинковий потенціал, термостат тощо;	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i> <i>Практичні роботи</i>	<i>Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит</i>	10
2.2	Вміти: визначати, який метод розрахунку можна застосувати до конкретної наукової проблеми виходячи з її просторової та часової розмірності. Знати, які відповідні програмні пакети існують для такого роду розрахунків.	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i> <i>Практичні роботи</i>	<i>Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит</i>	15
2.3	Вміти: знаходити у довідниковій літературі відповідні параметри, що необхідні для проведення моделювання властивостей твердих тіл, наприклад: кристалічні матричні елементи для проведення напівемпіричних розрахунків електронної структури чи параметри для парних чи багаточастинкових потенціалів для розрахунків методом молекулярної динаміки тощо.	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i> <i>Практичні роботи</i>	<i>Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит</i>	15

3.1.	Демонструвати спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією, ведення професійної наукової дискусії	<i>Лекції Самостійна робота Практичні роботи</i>	<i>Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, іспит</i>	10
3.2.	Письмово відображувати та презентувати результати своїх досліджень українською мовою	<i>Лекції Самостійна робота Практичні роботи</i>	<i>Модульна контрольна робота, Звіти про виконання практичних робіт, іспит</i>	10

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін)

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни					
	1.1	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2
ПРН.5.1. Знати ґрунтовні знання предметної області та розуміння професії;	+					
ПРН 1.12. Знати програмні пакети для розрахунку електронної та атомної структури матеріалів.	+	+	+			
ПРН 1.16. Знати методи квантово-хімічних розрахунків;	+	+	+			
ПРН 1.17. Знати програмні пакети - GAUSSIAN, MATLAB, Mathematica, Oridgin.;	+	+	+			
ПРН 2.11. Вміти обирати відповідні програмні пакети для наукових розрахунків.		+	+	+		
ПРН 3.1. Володіти здатністю презентувати результати своїх досліджень на наукових конференціях, семінарах, практично використовувати іноземну мову (в першу чергу - англійську) у науковій діяльності;					+	+
ПРН.4.1. Аналізувати наукові праці, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання;	+				+	+
ПРН 4.2. Здійснювати моніторинг наукових джерел інформації відносно досліджуваної проблеми;	+				+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. *Модульна контрольна робота* : РН 1.1, 3.2- 30 балів / 10 балів

2. *Захист звітів практичних робіт* : РН 2.1-2.3, 3.2 - 15 балів / 5 балів

3. *Захист реферату* : РН 1.1, 3.1 - 15 балів / 5 балів

- підсумкове оцінювання: у формі іспиту

Підсумкова оцінка з освітнього компонента в цілому, підсумковою формою контролю за яким встановлено іспит, визначається як сума оцінок (балів) за всіма успішно оціненими результатами навчання під час семестру (оцінки нижче мінімального порогового рівня до підсумкової оцінки не додаються) та оцінки, отриманої під час іспиту.

Формою проведення іспиту є написання письмової роботи з подальшою усною співбесідою. Результатами навчання, які оцінюються на іспиті, є РН 1.1-3.2. Максимальна кількість балів, яка може бути отримати здобувачем освіти під час іспиту, становить 40 балів за 100 бальною шкалою.

Перекладання семестрового контролю з метою покращення позитивної оцінки не допускається.

- умови допуску до підсумкового іспиту:

Обов'язковою умовою допуску до іспиту є відпрацювання всіх практичних робіт та написання модульної контрольної роботи. Здобувач освіти не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 20 балів.

7.2. Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи 1 - 2 проводяться по завершенні тематичних лекцій з Розділів 1-2 відповідно.

Захист звітів практичних робіт проводиться упродовж семестру.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

**8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ**

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	Самостійна робота
1	<p>Topic 1. Features of the main methods of numerical modeling of electronic structure. Their capabilities and limitations of use: time and space scales. (12 hours)</p> <p>The electronic structure of the system. Basic definitions and approximations. Crystals, nanoparticles and molecules. Zone methods. Cluster methods. A review of the methods of numerical modeling of the electronic and atomic structure of materials, the limitation of their use - time and space scale.</p> <p>Students' independent work: The study of lecture material.</p> <p>Features of the implementation of theoretical methods for calculating the electronic structure in modern software packages - a bridge between theory and practice./</p> <p>ТЕМА 1. Особливості основних методів чисельного моделювання електронної структури. Їх можливості та обмеження застосування – часова та просторова шкала. (12 год.)</p> <p>Електронна структура системи. Основні визначення та наближення. Кристали, наночастинки та молекули. Зонні методи. Кластерні методи. Огляд методів чисельного моделювання електронної та атомної структури матеріалів, обмеження їх застосування – часова та просторова шкала.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекцій.</p> <p>Особливості реалізації теоретичних методів розрахунку електронної структури в сучасних програмних пакетах – міст між теорією та практикою.</p>	2		12
2	<p>Topic 2. Electronic states. Hartree-Fock equations. (16 hours)</p> <p>Hamiltonian of crystal. Adiabatic approximation (Born–Oppenheimer approximation). Electronic states. Multi-electronic problem. Self-consistent field method. Hartree equations and Hartree-Fock equations. Slater determinant.</p> <p>Hartree-Fock equations. Basic functions: plane waves, Slater orbitals, Gauss orbitals, numerical orbitals. Rutan's equations. Calculation algorithm. Quantum Monte Carlo methods.</p> <p>Students' independent work: The study of the lecture material.</p> <p>Localized and delocalized valence bond. The correlation between the electronic structure of atoms and atomic structure./</p> <p>ТЕМА 2. Електронні стани. Рівняння Хартри-Фока. (16 год.)</p> <p>Гамільтоніан кристалу. Адіабатичне наближення. Електронні стани. Багатоелектронна проблема. Наближення самоузгодженого поля. Рівняння Хартрі та рівняння Хартрі-Фока. Визначник Слетера.</p> <p>Рівняння Хартри-Фока. Базисні функції: плоскі хвилі, орбіталі Слетера, орбіталі Гауса, числові орбіталі. Рівняння Рутана. Алгоритм розрахунку. Квантові методи Монте-Карло.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Локалізований і делокалізований валентний зв'язок. Кореляція між електронною структурою атомів і атомною структурою.</p>	4		12
3	<p>Topic 3. Selected methods for calculating the electronic</p>	2		12

	<p>structure of solids (12 hours)</p> <p>The theoretical foundations of modern methods for calculating the electronic structure of materials and the corresponding modern software packages. Features of the wave function of valence electrons. Cell method. The method of augmented plane waves.</p> <p>Projector augmented wave method. Pseudopotential method. Properties of the pseudopotentials. Model pseudopotentials.</p> <p>Students' independent work: The study of the lecture material.</p> <p>Electronic states of a non-ideal crystal. Wannier functions. Equations for the wave function of an electron in an impurity field./</p> <p>ТЕМА 3. Вибрані методи розрахунку електронної структури твердих тіл (12 год.)</p> <p>Теоретичні основи сучасних методів розрахунку електронної структури матеріалів та відповідні сучасні програмні пакети. Особливості хвильової функції валентних електронів. Метод комірок. Метод приєднаних плоских хвиль.</p> <p>Метод ортогоналізованих плоских хвиль. Метод псевдопотенціалу. Властивості псевдопотенціалу. Модельний псевдопотенціал.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Електронні стани неідеального кристалу. Теорема Вань'є. Рівняння для хвильової функції електрона в полі домішки.</p>			
4	<p>Topic 4. Density functional theory (14 hours)</p> <p>The Nobel Lecture of W. Kohn 1999 - "Electronic Structure of Matter – Wave Functions and Density Functionals." Wave functions for many-body systems. "Exponential wall." Density functional theory - the main points and advantages.</p> <p>Thomas–Fermi model. The theory of the density functional in the formulation of Hohenberg–Kohn. The self-consistent Kohn–Sham equations. The approximation for the exchange potential: the local density approximation and the general gradient approximation.</p> <p>Students' independent work: The study of the lecture material.</p> <p>Hamiltonian of disordered alloy. Green's function. Impurity levels./</p> <p>ТЕМА 4. Теорія Функціонала Густини (14 год.)</p> <p>Нобелівська лекція В.Кона 1999р. – «Електронна структура речовини – хвильові функції та функціонал густини». Хвильові функції для багатоелектронних систем. «Експоненціальна стінка». Теорія Функціонала Густини – основні положення та переваги.</p> <p>Теорія Томаса-Фермі. Теорія функціонала густини в формулюванні Хоенберга-Кона. Самоузгоджене рівняння Кона-Шема. Наближення для обмінного потенціалу: наближення локальної густини та загальне градієнтне наближення.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Гаміптоніан неупорядкованого сплаву. Функція Гріна. Домішкові рівні.</p>	4	1	12

	<p>Topic 5. The LCAO method is a linear combination of atomic orbitals. (12 hours)</p> <p>The main provisions of the LCAO method (linear combination of atomic orbitals). Simple ionic bond (LCAO). Bonding and anti-bonding orbitals. The degree of ionicity and the degree of covalency.</p> <p>Simple covalent bond. Electronic structure of diatomic molecules in the framework of the LCAO (case of nontransition elements). Matrix elements of the Hamiltonian (along s- and p-orbitals). Filling molecular levels of homeopolar diatomic molecules and their properties.</p> <p>Calculation of the energy zones of crystals by the LCAO method — on the example of a CsCl-type crystal. Reciprocal lattice, Brillouin zone, symmetric directions. Approximation of the nearest neighbors. Dispersion of electrons.</p> <p>Crystal matrix elements. Hückel method. Harrison's parameterization.</p> <p>Students' independent work: The study of the lecture material.</p> <p>Features of summation over the Brillouin zone: symmetric cases./</p> <p>ТЕМА 5. Метод ЛКАО - лінійна комбінація атомних орбіталей. (12 год.)</p> <p>Основні положення метода ЛКАО (лінійна комбінація атомних орбіталей). Простий іонний зв'язок (ЛКАО). Зв'язуючі та антизв'язуючі орбіталі. Ступінь іонності та ступінь ковалентності.</p> <p>Простий ковалентний зв'язок. Електронна структура двоатомних молекул в рамках ЛКАО (випадок неперехідних елементів). Матричні елементи гамільтоніана (по s- та p-орбіталах). Заповнення молекулярних рівнів гомеоплярних двоатомних молекул та їх властивості.</p> <p>Розрахунок енергетичних зон кристалів методом ЛКАО - на прикладі кристала типу CsCl. Оборнена гратка, зона Брілюена, симетричні напрямки. Наближення найближчих сусідів. Дисперсія електронів.</p> <p>Кристалічні матричні елементи. Метод Хюккеля. Параметризація Харісона.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Особливості сумування по зоні Брілюена: симетричні випадки.</p>	2		12
5	<p>Topic 6. Molecular dynamics method and empirical potentials. (12 hours)</p> <p>The classical method of molecular dynamics. Equations of motion. Calculation algorithm.</p> <p>Paired potentials (Lennard–Jones, Morse, Buckingham and others), their advantages and disadvantages. Embedded-atom potential. Many-particle potentials. Potentials for modeling macromolecules.</p> <p>The general structure of the MD modeling program. Initial conditions. Boundary conditions (periodic). Integration errors. Verlet scheme. Microcanonical and canonical ensembles. Bringing the system to balance: thermostats Berendsen, Gauss, Nose-Hoover, Langevin. Modeling of isobaric systems. Determination of temperature, pressure and other thermodynamic quantities.</p>	2		12

<p>Quantum method of molecular dynamics. The Bohr-Openheimer approximation and the Car-Parinello method.</p> <p>A review of the methods of numerical modeling of the electronic and atomic structure of solids, the limitations of their application - time and space scale. Demonstration of the results of numerical simulation in condensed matter physics.</p> <p>Students' independent work: The study of the lecture material.</p> <p>Overview of software packages for molecular dynamics modeling, their features./</p> <p>ТЕМА 6. Метод молекулярної динаміки та емпіричні потенціали. (12 год.)</p> <p>Класичний метод молекулярної динаміки. Рівняння руху. Алгоритм розрахунку.</p> <p>Парні потенціали (Ленарда-Джонса, Морзе, Бекінгема та інші), їх переваги та недоліки. Потенціал зануреного атома. Багаточастинкові потенціали. Потенціали для моделювання макромолекул.</p> <p>Загальна структура програми МД моделювання. Початкові умови. Граничні умови (періодичні). Похибки при інтегруванні. Схема Верле. Мікроканонічний та канонічний ансамблі. Вивід системи на рівновагу: термостати Берендсена, Гаусса, Нозе-Хувера, Ланжевена. Моделювання ізобаричних систем. Визначення температури, тиску та інших термодинамічних величин.</p> <p>Квантовий метод молекулярної динаміки. Наближення Бора-Опенгеймера та метод Кар-Парінелло.</p> <p>Огляд методів чисельного моделювання електронної та атомної структури твердих тіл, обмеження їх застосування – часова та просторова шкала. Демонстрація результатів чисельного моделювання в фізиці конденсованого стану.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Огляд програмних пакетів для моделювання методом молекулярної динаміки, їх особливості.</p>			
<p>Topic 7. Features of the main programs for ab initio calculations of electronic structure. (12 hours)</p> <p>A list of the main software packages (GAUSSIAN, ABINIT, VASP, GAMESS and others). Features of their application and capabilities. Demonstration of the work of the ABINIT package (distributed under an open license - General Public License).</p> <p>Students' independent work: The study of the lecture material.</p> <p>GAUSSIAN, ABINIT, VASP, GAMESS - distribution conditions and implementation features./</p> <p>ТЕМА 7. Особливості основних програм для ab initio розрахунків електронної структури. (12 год.)</p> <p>Перелік основних програмних пакетів (GAUSSIAN, ABINIT, VASP, GAMESS та інші). Особливості їх застосування та можливості. Демонстрація роботи пакета ABINIT (розповсюджується по відкритій ліцензії).</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>GAUSSIAN, ABINIT, VASP, GAMESS – умови розповсюдження та особливості реалізації.</p>	2	2	12
<p><i>Підсумкова модульна контрольна робота</i></p>		1	12

	ВСЬОГО	18	4	96
--	---------------	-----------	----------	-----------

Примітка: слід зазначити теми, винесені на самостійне вивчення

Загальний обсяг 120 год.¹, в тому числі:

Лекцій – **18 год.**

Семінари – **0 год.**

Практичні заняття – **4 год.**

Лабораторні заняття – **0 год.**

Тренінги – **0 год.**

Консультації - 2_ год.

Самостійна робота - **96 год.**

9.РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА²:

Основна: (Базова)

1. R.Martin Electronic Structure. Basic theory and practical methods. Cambrige 2004
2. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. Т.1,2. М.: Мир, 1983.
3. Ашкрофт А., Мермин Дж. Физика твердого тела. Т.1,2. М.: Мир, 1979,
4. Д.В. Хеерман. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990. 176 с.
5. Х. Гулд, Я.Тобочник Компьютерное моделирование в физике. Москва, Мир,1990, т.1-2
6. В.Кон Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности. – Успехи физ. наук, Том 172, №3.
7. Фишер И. З. Статистическая теория жидкостей. Серия: Современные проблемы физики. М.: Наука. 1961г. 280 с.
8. Grozin. Introduction to *Mathematica* for Physicists. Publisher: Springer, 2013, 197 p.

Додаткова:

1. Шпак А.П., Куницький Ю.А., Федоров В.Є. Електронна структура та властивості твердих тіл. Київ 2004
2. Займан Дж. Модели беспорядка. М: Мир, 1982, 423 с.
3. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М. Наука, 1978.
4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: Наука , 1978.- 792 с.
5. Займан Дж. Принципы теории твердого тела, М.Мир, 1966.
6. Маделунг О. Теория твердого тела. М. Наука, 1980.
7. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М. Наука, 1967.
8. Физика твердого тела / Энциклопедический словарь под ред. В.Г.Барьяхтара. - Киев: Наукова думка, 1966. - 452 с.
9. http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_chemistry_computer_programs
10. <https://www.abinit.org/>

¹ Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.

² В тому числі Інтернет ресурси