

Перелік питань до самостійного вивчення з дисципліни “Квантово-хімічні розрахунки властивостей матеріалів”

Тема 1. Основи атомістичної інформатики матеріалів

Історія розвитку атомістичних розрахунків у матеріалознавстві.

Тема 2. Базовий інструментарій атомістичної інформатики матеріалів

Порівняння Python з іншими мовами програмування, що використовуються в наукових розрахунках (наприклад, Fortran, C++, Julia).

Тема 3. Програмне середовище для атомістичного моделювання Atomic Simulation Environment (ASE)

Огляд альтернативних програмних середовищ для атомістичного моделювання, таких як LAMMPS, VASP, Gaussian.

Тема 4. Основні теоретичні положення теорії функціоналу електронної густини (DFT)

Гіпотеза Гоенберга—Кона та її значення для квантово-хімічних розрахунків.

Тема 5. Основи роботи з пакетом програм Quantum Espresso

Структура вхідних файлів Quantum Espresso: формат і ключові параметри.

Тема 6. Рівноважна структура матеріалів з DFT: теоретичні основи

Алгоритми мінімізації енергії структури — порівняння методів градієнтного спуску та методу Ньютона—Рафсона.

Тема 7. Оптимізація структури матеріалу у Quantum Espresso. Розрахункові спектри дифракції X-променів

Принципи обробки експериментальних XRD-спектрів та їх порівняння з теоретичними розрахунками.

Тема 8. Розрахунок термодинамічних параметрів утворення та змішування твердих речовин з DFT

Концепція термодинамічної стабільності фаз — критерії та експериментальні методи визначення.

Тема 9. Розрахунок термодинамічних параметрів утворення та змішування твердих речовин у Quantum Espresso

Моделювання неупорядкованих твердих розчинів — метод Монте—Карло та його застосування.

Тема 10. Вібраційні термодинамічні властивості з DFT: теоретичні основи

Теоретичні основи інфрачервоної спектроскопії та її застосування в матеріалознавстві.

Тема 11. Розрахунок вібраційних термодинамічних властивостей з Quantum Espresso та thermos_pw

Методи обчислення фононних спектрів — порівняння підходів (DFPT vs. frozen phonon).

Тема 12. Поза основами: складні розрахунки з DFT

Зонна структура напівпровідників — методи розрахунку та вплив обмінно-кореляційного функціоналу.

Тема 13. Методи машинного навчання в матеріалознавстві

Відмінності між класичними алгоритмами машинного навчання (SVM, Random Forest) та глибокими нейронними мережами.

Тема 14. Атомістичне моделювання твердих розчинів з використанням класичного машинного навчання

Вплив вибору базисних функцій у моделі кластерного розкладу на точність передбачень.

Тема 15. Міжатомні потенціали машинного навчання для атомістичного моделювання складних систем значного розміру

Порівняння класичних міжатомних потенціалів (LJ, EAM) з потенціалами машинного навчання (GAP, NequIP).

Тема 16. Відкриті масивні бази даних результатів атомістичного моделювання матеріалів

Структура та формат даних у Materials Project і можливості API для автоматизації досліджень.