

## 1. Опис навчальної дисципліни

(Витяг з робочої програми навчальної дисципліни  
 “Метод функціонала густини в теорії конденсованих систем”)

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
		<i>денна форма навчання</i>
Кількість кредитів — <b>2</b>		Нормативна
Модулів — <b>1</b>	Напрямок підготовки <b>0701 Фізика</b>	<i>Рік підготовки:</i> <b>4-й</b>
Змістових модулів — <b>2</b>	Спеціальність <b>7.070101 Фізика</b> спеціалізація «Теоретична фізика»	
Загальна кількість годин — <b>66</b>		
Тижневих годин для денної форми навчання: <i>аудиторних</i> — 2 <i>самостійної роботи студента</i> — 2	Освітньо-кваліфікаційний рівень: <b>бакалавр</b>	<i>Лекції</i> <b>16 год.</b>
		<i>Практичні, семінарські</i> —
		<i>Лабораторні</i> <b>16 год</b>
		<i>Самостійна робота</i> <b>32 год.</b>
		<i>Вид контролю:</i> <b>залік</b>

## **2. Мета та завдання навчальної дисципліни**

**Мета:** формування в майбутнього фізика цілісної картини фізичних явищ, пов'язаних із мікросвітом.

**Завдання:** навчити студентів самостійно виконувати розрахунки, необхідні для розв'язування задач, пов'язаних із неоднорідними властивостями класичних систем багатьох частинок.

В результаті вивчення даного курсу студент повинен

**знати** основні поняття та рівняння предмету викладені у програмі курсу.

**вміти:** застосовувати метод функціонала густини до розрахунку поверхневого натягу, нуклеаційного та кавітаційного бар'єра класичних плинів володіти математичним апаратом функціонального диференціювання та інтегрування.

Для вивчення дисципліни необхідні знання з таких розділів математики і фізики: математичний аналіз, функціонали, механіка, молекулярна фізика, статистична фізика, квантова механіка.

## **3. Програма навчальної дисципліни**

### **МОДУЛЬ**

#### **Змістовий модуль 1. Статистична механіка і фазовий перехід газ-рідина**

**Тема 1.** Від механіки частинок до термодинаміки: метод Гіббса. Рівняння Ван дер Ваальса. Фазовий перехід газ-рідина у плинні Ван дер Ваальса.

**Тема 2.** Поверхневий натяг. Метастабільні стани плинну. Радіус Томсона.

**Тема 3.** Термодинаміка нуклеації. Формула Гіббса. Експериментальне вимірювання швидкості нуклеації.

#### **Змістовий модуль 2. Метод функціонала густини і властивості неоднорідних класичних плинів**

**Тема 1.** Функціонали у класичній статистичній механіці. Функціональне диференціювання: означення.

**Тема 2.** Функціональне диференціювання щодо густини частинок, зовнішнього потенціалу, попарно адитивного потенціалу міжчастинкової взаємодії. Функціональне інтегрування щодо густини частинок, зовнішнього потенціалу, попарно адитивного потенціалу міжчастинкової взаємодії.

**Тема 3.** Наближення середнього поля. Властивості однорідного плинну. Фазова діаграма газ-рідина.

**Тема 4.** Планарна міжфазна поверхня. Коефіцієнт поверхневого натягу. Сферична міжфазна поверхня. Нуклеаційний та кавітаційний бар'єр. Вихід за межі наближення середнього поля.

#### 4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	ср
1	2	3	4	5	6	7
<b>МОДУЛЬ</b>						
<b>Змістовий модуль 1. Статистична механіка і фазовий перехід газ-рідина</b>						
<b>Тема 1.</b> Від механіки частинок до термодинаміки: метод Гіббса. Рівняння Ван дер Ваальса. Фазовий перехід газ-рідина у плинні Ван дер Ваальса	4	2				2
<b>Тема 2.</b> Поверхневий натяг. Метастабільні стани плинну. Радіус Томсона	6	2		2		2
<b>Тема 3.</b> Термодинаміка нуклеації. Формула Гіббса. Експериментальне вимірювання швидкості нуклеації	4	2				2
<i>Разом – зм. модуль 1</i>	<b>14</b>	<b>6</b>		<b>2</b>		<b>6</b>
<b>Змістовий модуль 2. Метод функціонала густини і властивості неоднорідних класичних плиннів</b>						
<b>Тема 1.</b> Функціонали у класичній статистичній механіці. Функціональне диференціювання: означення	6	2				4
<b>Тема 2.</b> Функціональне диференціювання щодо густини частинок, зовнішнього потенціалу, попарно адитивного потенціалу міжчастинкової взаємодії. Функціональне інтегрування щодо густини частинок, зовнішнього потенціалу, попарно адитивного потенціалу міжчастинкової взаємодії	16	4		2		10
<b>Тема 3.</b> Наближення середнього поля. Властивості однорідного плинну. Фазова діаграма газ-рідина	12	2		4		6
<b>Тема 4.</b> Планарна міжфазна поверхня. Коефіцієнт поверхневого натягу. Сферична міжфазна поверхня. Нуклеаційний та кавітаційний бар'єр. Вихід за межі наближення середнього поля	12	2		6		6
<i>Разом – зм. модуль 2</i>	<b>46</b>	<b>10</b>		<b>14</b>		<b>26</b>
<b>Усього годин</b>	<b>60</b>	<b>22</b>		<b>16</b>		<b>32</b>

#### 5. Темі семінарських занять

Семінарські заняття в курсі не передбачені.

## 6. Теми практичних занять

Практичні заняття в курсі не передбачені.

## 7. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Метод групових розвинень	2
2	Побудова фазової діаграми газ-рідина	2
3	Тверді стержні в одному вимірі: точно вирішувана модель	2
4	Розрахунок коефіцієнта поверхневого натягу	4
5	Розрахунок нуклеаційного бар'єру	4
6	Гradientне наближення в методі функціонала густини	2
	<b>Разом</b>	<b>16</b>

## 8. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Метод групових розвинень	2
2	Побудова фазової діаграми газ-рідина	2
3	Тверді стержні в одному вимірі: точно вирішувана модель	2
4	Розрахунок коефіцієнта поверхневого натягу	4
5	Розрахунок нуклеаційного бар'єру	4
6	Гradientне наближення в методі функціонала густини	2
	<b>Разом</b>	<b>16</b>

## 10. Методи контролю

Контроль засвоєння матеріалу включає поточний контроль (підсумкове тестування за двома змістовими модулями, по 25 балів), разом за семестр 50 балів, залік (50 балів). Сумарна оцінка, таким чином, виставляється за 100-бальною шкалою.

## 11. Розподіл балів, що присвоюється студентам

*Розподіл балів, які отримують студенти*

Поточне тестування та самостійна робота		Іспит	Сума
Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2		
T1–T4	T5–T8		
25	25	50	100

### Шкала оцінювання: Університету, національна та ECTS

Оцінка в балах	Оцінка ECTS	Визначення	За національною шкалою	
			Екзаменаційна оцінка, оцінка з диференційованого заліку	Залік
90–100	A	<i>Відмінно</i>	<i>Відмінно</i>	<i>Зараховано</i>
81-89	B	<i>Дуже добре</i>	<i>Добре</i>	
71-80	C	<i>Добре</i>		
61-70	D	<i>Задовільно</i>	<i>Задовільно</i>	
51-60	E	<i>Достатньо</i>		

### 12. Методичне забезпечення

1. О. В. Держко, В. М. Мигаль, Вибрані питання теорії неоднорідних класичних плинів: Текст лекцій (Львів: ЛДУ імені Івана Франка, 1999, 108 с.).

### 13. Рекомендована література

#### Базова

1. К. Хир, Статистическая механика, кинетическая теория и стохастические процессы (Мир, Москва, 1976).
2. К. Хуанг, Статистическая механика (Мир, Москва, 1966).
3. С. Оно, С. Кондо, Молекулярная теория поверхностного натяжения в жидкостях (Иностранная литература, Москва, 1963).
4. В. Б. Кобилянський, Статистична фізика (Вища школа, Київ, 1972).
5. D. W. Oxtoby, Homogeneous nucleation: theory and experiment. Journal of Physics: Condensed Matter, 1992, vol. 4, p. 7627-7650 .
6. Fundamentals of Inhomogeneous Fluids, edited by D. Henderson (Marcel Dekker, New York, 1992).
7. Дж. Роулинсон, Б. Уидом, Молекулярная теория капиллярности (Мир, Москва, 1986).
8. О. В. Держко, В. М. Мигаль, Неоднорідні властивості плину атомів у електричному полі. Журнал фізичних досліджень, 1997, том 1, N 3, с. 402-412.
9. О. В. Держко, В. М. Мигаль, Нуклеаційні явища у плинні атомів в електричному полі. Журнал фізичних досліджень, 1998, том 2, N 3, с.~339-345.
10. О. В. Держко, В. М. Мигаль, Властивості неоднорідного плину атомів в електричному полі. Градієнтне наближення. Журнал фізичних досліджень, 2000, том 4, N 4, с. 424-430.
11. O. V. Derzhko, V. M. Myhal, Nucleation phenomena in a nonuniform atomic fluid in the electrical field. Journal of Molecular Liquids, 2001, vol. 92, p. 15-20.
12. О. В. Держко, В. М. Мигаль, Вибрані питання теорії неоднорідних класичних плинів: Текст лекцій (Львів: ЛДУ імені Івана Франка, 1999, 108 с.).
13. О. В. Держко, В. М. Мигаль, Властивості двофазного плину дворівневих атомів, частина з яких перебуває у збудженому стані. Метод функціонала густини. Журнал фізичних досліджень, 2005, том 9, N 2, с. 156-162.
14. О. В. Держко, В. М. Мигаль, Властивості двофазного плину дворівневих атомів, частина з яких перебуває у збудженому стані. Кавітація. Журнал фізичних досліджень, 2006, том 10, N 3, с. 203-207.
15. O. V. Derzhko, V. M. Myhal. A microscopic theory of photonucleation: Density functional approach to the properties of a fluid of two-level atoms, a part of which is excited Condens. Matter Phys. 9, No. 4(48), 2006, P. 703-708.

### **Допоміжна**

1. М. Фольмер, Кинетика образования новой фазы (Наука, Москва, 1986).
2. R. Evans, The nature of the liquid-vapour interface and other topics in the statistical mechanics of non-uniform, classical fluids. *Advances in Physics*, 1979, vol. 28, No. 2, p. 143-200.
3. И. П. Базаров, Термодинамика (Высшая школа, Москва, 1991).
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Статистическая физика, часть 1, том 5 (Наука, Москва, 1976).

### ***14. Інформаційні ресурси***

1. Wikipedia. <http://www.wikipedia.org>