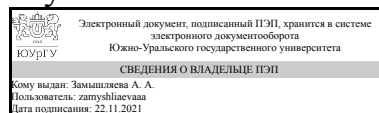


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Институт естественных и точных
наук



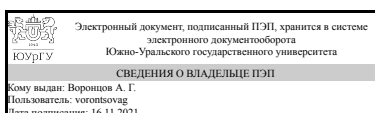
А. А. Замышляева

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины П.1.В.06.01 Массивные вычисления и компьютерное моделирование в современной физике
для направления 03.06.01 Физика и астрономия
уровень аспирант тип программы
направленность программы
форма обучения очная
кафедра-разработчик Физика наноразмерных систем

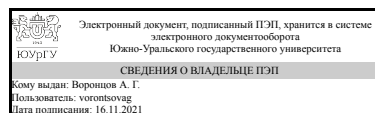
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия, утверждённым приказом Минобрнауки от 30.07.2014 № 867

Зав.кафедрой разработчика,
д.физ.-мат.н., доц.



А. Г. Воронцов

Разработчик программы,
д.физ.-мат.н., доц., заведующий
кафедрой



А. Г. Воронцов

1. Цели и задачи дисциплины

получение фундаментальных знаний в области физики и методов компьютерного моделирования конденсированных состояний материалов, углубленных представлений об электронной и атомно-кристаллической структуре конденсированных тел, и их физических свойствах (электронных, магнитных, механических, оптических, тепловых и др.), взаимосвязи между атомно-электронной структурой, составом и различными физическими свойствами материалов, а также методах определения физических свойств и оценки функциональных характеристик материалов, Кроме того, освоение дисциплины должно способствовать формированию профессиональных компетенций, определяемых профилем программы аспирантуры.

Краткое содержание дисциплины

Строение вещества. Электронная структура атомов. Химическая связь и ближний порядок. Электронные свойства твердых тел. Основные приближения зонной теории. Суть и границы применимости адиабатического приближения в разделении электронного и ядерного движений в кристалле, самосогласованных методов Хартри и Хартри-Фока, циклических граничных условий Борна-Кармана, изучение общих свойств электронов в периодическом поле, приближения почти свободных электронов и сильной связи, принципов построения поверхности Ферми в металлах, приближения эффективной массы в законе дисперсии. Математическое описание колебаний решётки с применением нормальных координат и обобщенных импульсов, гармонического приближения, динамической матрицы, связь закона дисперсии колебаний со структурой и размерностью кристаллической решётки, квантование колебаний. Идеи Ландау об элементарных возбуждениях, квазичастицах. Теоретические основы первопринципных и полуэмпирических методов моделирования атомной и электронной структуры конденсированных систем. Методика применения существующих пакетов компьютерного моделирования (WIEN-2k, SIESTA, LAMMPS) для расчетов структуры, электронных, колебательных и термодинамических характеристик материалов. Теория функционала плотности (ТФП). Методы расчета энергетического спектра электронов в твердых телах. Применение современных пакетов расчета полной энергии кристалла в рамках ТФП для расчета различных характеристик материалов (энергия точечных и плоских дефектов структуры, спектры колебаний решетки, электронные, магнитные и тепловые свойства твердых тел).

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (ЗУНы)
ПК-2.1 умением проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твердом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях	Знать: Теоретические основы атомистических расчетов физических свойств конденсированных сред и материалов, сопоставление результатов моделирования с термодинамическими характеристиками и данными экспериментальных методик исследования. Методику применения существующих пакетов

	<p>компьютерного моделирования (WIEN-2k, SIESTA, LAMMPS, ABINIT) для расчетов структуры, электронных, колебательных и термодинамических характеристик материалов.</p> <p>Уметь: Проводить компьютерное моделирование физических свойств материалов с использованием одного из пакетов для атомистического моделирования (WIEN-2k, SIESTA, LAMMPS, ABINIT), объяснять строение и свойства материалов с позиций квантовой химии и физики твердого тела. Прогнозировать качественные и количественные характеристики структуры, механических, колебательных, магнитных и электронных свойств конденсированных систем, объемных, поверхностных и дефектных состояний реальных кристаллов; проводить на основе результатов моделирования интерпретацию имеющихся экспериментальных данных о материалах.</p> <p>Владеть: навыками решения практических задач физического материаловедения путем использования методов компьютерного моделирования материалов.</p>
<p>ПК-3.1 умением проводить исследования физических явлений, составляющих основу для разработок и создания новых электронных приборов и устройств</p>	<p>Знать: Основы физических явлений, используемых для создания и разработки новых электронных приборов и устройств, дать их математическое описание, устанавливать связи между явлениями. Теоретические и практические основы атомистических расчетов физических свойств конденсированных сред и материалов, сопоставление результатов моделирования с термодинамическими характеристиками и данными экспериментальных методик исследования. Методику применения существующих пакетов компьютерного моделирования (WIEN-2k, SIESTA, LAMMPS, ABINIT) для расчетов структуры, электронных, колебательных и термодинамических характеристик материалов. Идеи Ландау об элементарных возбуждениях, квазичастицах. Особенности низкоразмерных проводников, природу баллистической проводимости в наноконтактах, формулу Ландауэра.</p> <p>Уметь: Объяснять строение и свойства материалов с позиций квантовой химии и физики твердого тела. Проводить компьютерное моделирование физических свойств материалов с использованием одного из пакетов для атомистического моделирования (WIEN-2k, SIESTA, LAMMPS, ABINIT). Прогнозировать качественные и количественные характеристики структуры, механических, колебательных, магнитных и электронных свойств конденсированных систем, объемных,</p>

	поверхностных и дефектных состояний реальных кристаллов; проводить на основе результатов моделирования интерпретацию имеющихся экспериментальных данных о материалах.
	Владеть:современными компьютерными технологиями исследования физических свойств кристаллических и конденсированных систем на основе одного из применяемых в мировой практике компьютерных пакетов программ SIESTA, WIEN-2k, LAMMPS, ABINIT, ESPRESSO, навыками решения практических задач физического материаловедения, возникающих при разработке новых инновационных технологий, путем использования методов компьютерного моделирования материалов.

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	Научно-исследовательская деятельность (3 семестр)

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	Знать:современные библиографические и реферативные базы данных и методы поиска публикаций в них Уметь:осуществлять поиск научной информации в библиотеке и сети интернет Владеть:навыками сбора, обработки и анализа научной информации Знать:основы организации научной деятельности в области компьютерного материаловедения Уметь:получать доступ к распределенным вычислительным ресурсами, обрабатывать полученные данные Владеть:методами работы на распределенных вычислительных ресурсах, обработки и представления результатов

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 ч.

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		2

Общая трудоёмкость дисциплины	108	108
<i>Аудиторные занятия:</i>	40	40
Лекции (Л)	40	40
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0
Лабораторные работы (ЛР)	0	0
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	68	68
Изучение тем вынесенных на самостоятельную проработку	10	10
Изучение руководств по использованию пакетов программ компьютерного моделирования	15	15
Проведение моделирования свойств металлического кристалла	20	20
Подготовка к экзамену	23	23
Вид итогового контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Основы компьютерного моделирования материалов	14	14	0	0
2	Методы расчёты электронной структуры и пакеты программ для их реализации	16	16	0	0
3	Электронные свойства низкоразмерных проводников и наноконтактов в современных электронных устройствах	10	10	0	0

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	1	История развития квантовой теории конденсированных тел. Основные используемые приближения (адиабатическое приближение, самосогласованное поле Хартри)	2
2	1	Вариационный метод решения уравнения Шредингера	2
3	1	Теория Хартри-Фока, ее достоинства и недостатки. Понятие о энергии корреляции.	2
4	1	Теория Томаса-Ферми. Основные положения теории функционала плотности.	2
5	1	Уравнения Кона-Шэма	4
6	1	Приближения для обменно-корреляционного функционала. Приближение локальной спиновой плотности.	2
7	2	Теорема Блоха. Граничные условия Борна-Кармана. Приближение почти свободных электронов. Понятие зоны Бриллюэна и ее связь с дифракцией электронов на решетке.	2
8	2	Метод плоских волн, его трудности	2
9	2	Метод псевдопотенциала, способы построения псевдопотенциалов.	2
10	2	Пакеты VASP и Quantum ESPRESSO, использующие метод плоских волн, их достоинства и недостатки	2
11	2	Метод сильной связи. Зонная структура спектра электронов в кристаллах. Диэлектрики, полупроводники, металлы.	2

12	2	Применение метода сильной связи для расчетов зонной структуры графена. Пакет SIESTA.	2
13	2	Ячеичные методы расчета зонной структуры. Пакет WIEN-2k	4
14	3	Особенности плотности электронных состояний в низкоразмерных проводниках с 2,1,0-мерной структурой.	2
15	3	Наноконтакты. Понятие баллистической проводимости, физическая модель для ее описания. Формула Ландауера для идеального контакта.	2
16	3	Метод функций Грина в методе сильной связи	2
17	3	Формула Ландауера для реального наноконтакта с рассеянием. Применение функций Грина для описания рассеяния.	2
18	3	Применение пакета TransSiesta для расчета проводимости наноконтактов.	2

5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС		
Вид работы и содержание задания	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц)	Кол-во часов
Подготовка к экзамену	1. Гельчинский, Б. Р. Вычислительные методы микроскопической теории металлических расплавов и нанокластеров Текст Б. Р. Гельчинский, А. А. Мирзоев, А. Г. Воронцов. - М.: Физматлит, 2011. - 196 с. (главы 1-3) 2. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела Т. 1 В 2-х т. Пер. с англ. Михайлова А. С.; Под ред. Каганова М. И. - М.: Мир, 1979. - 399 с. (Глава 1) 3. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела Т. 2 Пер. с англ.: В 2-х т. Пер. Кугеля К. И., Михайлова А. С.; Под ред. Каганова М. И. - М.: Мир, 1979. - 422 с. (глава 31) 4) Вонсовский, С. В. Квантовая физика твердого тела. - М.: Наука, 1983. - 336 с. ил. (главы 3-5)	23
Изучение руководств по использованию пакетов программ компьютерного моделирования	1. Созыкин, С. А. Физика наноразмерных систем [Текст] Ч. 1 учеб. пособие по направлению 03.04.01 "Приклад. математика и физика" С. А. Созыкин, А. Н. Соколов ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Компьютер. моделирование и нанотехнологии ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2016. - (страницы 1 - 112). 2. User's guide "SIESTA" https://departments.icmab.es/leem/siesta/Documentation/index.html 3. User's guide "WIEN-2k" http://susi.theochem.tuwien.ac.at/	15
Изучение тем вынесенных на самостоятельную проработку	1. Н.Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела.- М.: Мир, 1979, Т.1, (глава 1, с.17-35). 2. Н.Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела.- М.: Мир, 1979, Т.2, (глава 31 с.259-280; глава 32 с.289-303) 3. Вонсовский, С. В. Квантовая физика твердого тела. - М.: Наука, 1983. - 336 с. ил. (главы 3-5)	10
Проведение моделирования свойств металлического кристалла	1. Гельчинский, Б. Р. Вычислительные методы микроскопической теории металлических расплавов и нанокластеров Текст Б. Р. Гельчинский, А. А. Мирзоев, А. Г.	20

6. Инновационные образовательные технологии, используемые в учебном процессе

Инновационные формы учебных занятий	Вид работы (Л, ПЗ, ЛР)	Краткое описание	Кол-во ауд. часов
Активная форма обучения	Лекции	Лекция строится как дискуссия между преподавателем и студентом	36

Собственные инновационные способы и методы, используемые в образовательном процессе

Не предусмотрены

Использование результатов научных исследований, проводимых университетом, в рамках данной дисциплины: В рамках данной дисциплины используются результаты научных исследований в области многомасштабного компьютерного моделирования материалов

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.1. Паспорт фонда оценочных средств

Наименование разделов дисциплины	Контролируемая компетенция ЗУНы	Вид контроля (включая текущий)	№№ заданий
Методы расчёты электронной структуры и пакеты программ для их реализации	ПК-2.1 умением проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твёрдом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях	Самостоятельная работа по моделированию свойств материала с помощью пакетов программ WIEN-2k или SIESTA	1
Все разделы	ПК-2.1 умением проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твёрдом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях	экзамен	2
Все разделы	ПК-3.1 умением проводить исследования физических явлений, составляющих основу для разработок и создания новых электронных приборов и устройств	экзамен	2

7.2. Виды контроля, процедуры проведения, критерии оценивания

Вид контроля	Процедуры проведения и оценивания	Критерии оценивания
--------------	-----------------------------------	---------------------

Самостоятельная работа по моделированию свойств материала с помощью пакетов программ WIEN-2k или SIESTA	недельная самостоятельная работа по моделированию свойств заданного материала, оценивается качество выполнения	Зачтено: при отклонении моделируемой характеристики от данных эксперимента не более 20%, мотивированном выборе всех параметров моделирования, проведении проверки сходимости результатов относительно основных параметров. Не зачтено: при отклонении моделируемой характеристики от данных эксперимента более чем на 20%, немотивированном выборе параметров моделирования, отсутствии проверки сходимости результатов относительно основных параметров.
экзамен	Устный экзамен. В билете два теоретических вопроса, на подготовку 2 часа. Для получения оценки за экзамен необходим зачет по самостоятельной работе.	Отлично: полный ответ на оба вопроса, демонстрирующий владение материалом, знание основных физических законов, определяющих изменение свойств материала при различных воздействиях + зачет по самостоятельной работе Хорошо: ответ на оба вопроса, демонстрирующий владение большей частью материала, знание основных физических законов, определяющих изменение свойств материала при различных воздействиях + зачет по самостоятельной работе Удовлетворительно: ответ только на один из вопросов, демонстрирующий владение частью материала, знание основных физических законов, определяющих изменение свойств материала при различных воздействиях + зачет по самостоятельной работе Неудовлетворительно: неудовлетворительный ответ на оба вопроса, или отсутствие зачета по самостоятельной работе

7.3. Типовые контрольные задания

Вид контроля	Типовые контрольные задания
Самостоятельная работа по моделированию свойств материала с помощью пакетов программ WIEN-2k или SIESTA	Провести расчет равновесного параметра решетки, полной энергии и магнитного момента на атом ОЦК-фазы железа в основном состоянии. Сравнить полученные результаты с имеющимися в литературе экспериментальными данными. ОЦК-железо выбор оптимальных параметров.pdf
экзамен	в приложении Вопросы для экзамена по теме1.pdf

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Вонсовский, С. В. Квантовая физика твердого тела. - М.: Наука, 1983. - 336 с. ил.
2. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела Т. 1 В 2-х т. Пер. с англ. Михайлова А. С.; Под ред. Каганова М. И. - М.: Мир, 1979. - 399 с. ил.
3. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела Т. 2 Пер. с англ.: В 2-х т. Пер. Кугеля К. И., Михайлова А. С.; Под ред. Каганова М. И. - М.: Мир, 1979. - 422 с. ил.

б) дополнительная литература:

1. Анисимов, В. И. Электронная структура примесей и дефектов в переходных металлах, их сплавах и соединениях Отв. ред. Г. П. Швейкин; АН СССР, Урал. отд-ние, Ин-т химии. - М.: Наука, 1989. - 223 с. ил.
2. Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике Ч. 2 В 2 ч. Пер. с англ.: А. Н. Полюдова, В. А. Панченко. - М.: Мир, 1990. - 399 с. ил.

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

1. Физика металлов и металловедение науч.-техн. журн. Рос. акад. наук, Отд-ние общ. физики и астрономии, Урал. отд-ние РАН журнал
2. Физика твердого тела науч.-теорет. журн. Рос. акад. наук, Отд-ние общ. физики и астрономии, Физ.-техн. ин-т им. А. Ф. Иоффе журнал
3. Физика и химия обработки материалов науч.-техн. журн. Рос. акад. наук, Отд-ние физико-химии и технологии неорганич. материалов, Ин-т металлургии им. А. А. Байкова журнал
4. Acta metallurgica : науч. журн. New York : Pergamon Press , 1974-1989
5. Physical Review : Published for the American Physical Society by the American Institute of Physics , 1970-

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Созыкин, С. А. Физика наноразмерных систем [Текст] Ч. 1 учеб. пособие по направлению 03.04.01 "Приклад. математика и физика" С. А. Созыкин, А. Н. Соболев ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Компьютер. моделирование и нанотехнологии ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2016. - 112
2. Методические указания для самостоятельной работы студентов

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Созыкин, С. А. Физика наноразмерных систем [Текст] Ч. 1 учеб. пособие по направлению 03.04.01 "Приклад. математика и физика" С. А. Созыкин, А. Н. Соболев ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Компьютер. моделирование и нанотехнологии ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2016. - 112
2. Методические указания для самостоятельной работы студентов

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной	Библиографическое описание
---	----------------	------------------------------------	----------------------------

		форме	
1	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Ибрагимов, И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем. [Электронный ресурс] / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. — Электрон. дан. — СПб. : Лань, 2010. — 384 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/156
2	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Завадинский, В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2013. — 176 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/59650
3	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Гельчинский, Б. Р. Вычислительные методы микроскопической теории металлических расплавов и нанокластеров / Б. Р. Гельчинский, А. А. Мирзоев, А. Г. Воронцов. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2011. — 200 с. — ISBN 978-5-9221-1334-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/5262

9. Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Office(бессрочно)
2. -SIESTa(бессрочно)
3. -Wien2k(бессрочно)

Перечень используемых информационных справочных систем:

Нет

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Самостоятельная работа студента	249 (1)	компьютеры с установленным программным обеспечением
Лекции	305 (1а)	экран, проектор, компьютерное оборудование для лекций в виде электронных презентаций