

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ
проф. Таюрский Д.А.

"__" _____ 20__ г.

Программа дисциплины

Методы расчетов из первых принципов

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Теоретическая и математическая физика

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) Лысогорский Ю.В. ; доцент, к.н. Недопекин О.В. (Кафедра общей физики, Отделение физики), Oleg.Nedopekin@kpfu.ru

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1	способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу
ОПК-5	способностью использовать свободное владение профессионально-профилированными знаниями в области компьютерных технологий для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами направленности (профиля) подготовки
ОПК-6	способностью использовать знания современных проблем и новейших достижений физики в научно-исследовательской работе
ПК-1	способностью самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

Квантовохимические методы расчета энергии атомов, молекул и кристаллических структур. Основы теории функционала плотности. Свойства атомов, молекул и кристаллических структур, получаемых при помощи квантовохимических методов. Современное программное обеспечение для квантовохимических расчетов.

Должен уметь:

Проводить квантовомеханические расчеты свойств веществ. Выбрать подходящие методы расчета. Анализировать результаты компьютерного моделирования.

Должен владеть:

Пакетом программ вычислений MedeA.

Должен демонстрировать способность и готовность:

Проводить квантовомеханические расчеты, владеть пакетом вычислительных программ MedeA.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.4 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 03.04.02 "Физика (Теоретическая и математическая физика)" и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 1 курсе в 1, 2 семестрах.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных(ые) единиц(ы) на 216 часа(ов).

Контактная работа - 54 часа(ов), в том числе лекции - 36 часа(ов), практические занятия - 18 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 126 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 36 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: отсутствует в 1 семестре; экзамен во 2 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение. Роль ab-initio моделирования в современном технологическом процессе синтеза	1	5	0	0	13
2.	Тема 2. Подходы к описанию квантовомеханических систем. Уравнение Шредингера	1	5	0	0	13
3.	Тема 3. Основы теории функционала плотности.	1	5	0	0	13
4.	Тема 4. Решение уравнения Кона-Шэма. Ограничения теории функционала плотности.	1	3	0	0	15
5.	Тема 5. Дальнейшее развитие ТФП (DFT).	2	2	1	0	13
6.	Тема 6. Введение в MedeA.	2	4	1	0	15
7.	Тема 7. Ab-initio расчеты структур	2	4	1	0	15
8.	Тема 8. Определение различных свойств с помощью программы MedeA.	2	4	10	0	15
9.	Тема 9. Подготовка к экзамену.	2	4	5	0	14
	Итого		36	18	0	126

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Введение. Роль ab-initio моделирования в современном технологическом процессе синтеза

Обзор современных подходов и методов компьютерного конструирования молекулярных структур различных соединений на основе предварительного анализа связи между их структурой и свойствами. Роль ab-initio моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур. Преимущества и недостатки ab-initio моделирования. Основные положения.

Тема 2. Подходы к описанию квантовомеханических систем. Уравнение Шредингера

Приближения Борна-Оппенгеймера. Теорема Хелманна - Фейнмана (Hellmann-Feynman theorem). Базисные наборы волновых функций (локальный базис Попла и базис плоских волн). Приближения. Псевдопотенциалы.

Тема 3. Основы теории функционала плотности.

Уравнение Кона - Шэма (Kohn-Sham). Приближение локальной электронной плотности (LDA), обобщенное градиентное приближение (GGA), гибридный функционал (hybrid).

Тема 4. Решение уравнения Кона-Шэма. Ограничения теории функционала плотности.

Решение уравнения Кона-Шэма. Метод самосогласованного поля (self-consistent field). Ограничения теории функционала плотности: проблема ширины запрещенной зоны, отсутствие сильных корреляций и сил Ван-дер-Ваальса, ошибки в расчетах параметров решетки, когезионной энергии

Тема 5. Дальнейшее развитие ТФП (DFT).

Модель локального отталкивания Хаббарда (LSDA+U), Гибридный функционал (HSE0, PBE0,...)

Тема 6. Введение в MedeA.

Интерфейс программы MedeA. Архитектура всего комплекса. Сервер задач. Построитель молекул, построитель кристаллов.

Тема 7. Ab-initio расчеты структур

VASP. Расчет энергии. Обзор доступных методов и функционалов. Оптимизация структуры. Обзор доступных методов. Трехстадийная оптимизация. Критические параметры, влияющие на точность результатов. Методики оценки точности результатов. Automated Convergence

Тема 8. Определение различных свойств с помощью программы MedeA.

Зонные структуры, дисперсионные кривые электронов. Ширина запрещенной зоны. Оптическое поглощение. Electronic analysis (FERMI). Колебания. Инфракрасные спектры, рамановская спектроскопия. Дисперсионные кривые. PHONON. Переходные состояния. Диффузия на поверхности. Скорость реакции. Transition State Search

Тема 9. Подготовка к экзамену.

Обсуждение вопросов к экзамену.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;
- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

ABINIT - - <http://www.abinit.org/>

Ab-initio методы расчетов - <http://www.nmrportal.ru/book/export/html/485>

Gaussian - - <http://www.gaussian.com/>

Materials Design(C) - <http://materialsdesign.com/>

VASP - <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Можно выделить несколько видов самостоятельной работы студентов при изучении дисциплины.

Разбор и усвоение лекционного материала. После каждой лекции студенту следует внимательно прочитать и разобрать конспект, при этом:

- Понять все математические выкладки и лежащие в их основе физические положения и допущения; воспроизвести все выкладки самостоятельно, не глядя в конспект.
- Выполнить или доделать выкладки, которые лектор предписал сделать самостоятельно (если таковые имеются).

- Если лектор предписал разобрать часть материала более подробно самостоятельно по доступным письменным или электронным источникам, то необходимо своевременно это сделать.

- При возникновении каких-либо трудностей с пониманием материала рекомендуется попросить помощи у своих одногруппников или сокурсников. Также можно обратиться за помощью к лектору. Для этого можно лично подойти к преподавателю, либо написать ему электронное письмо, сформулировав в нём возникающие вопросы. К письму можно прикрепить какие-либо электронные материалы, связанные с возникшими вопросами, например, отсканированные или сфотографированные листочки с рукописными комментариями, пометками, выкладками и т.п.

Самостоятельное изучение части материала. Если часть учебного материала отведена на самостоятельное изучение, то необходимо приступить к этому незамедлительно после указания преподавателя и освоить материал в отведенные им сроки. Материал следует изучить по доступным письменным и электронным источникам, о которых сообщит преподаватель.

Подготовка к контрольным работам. То, как студент научился самостоятельно решать задачи, преподаватель проверяет посредством проведения контрольных работ, на которых от студента требуется решить несколько задач из числа тех, которые решались в аудитории, и тех, которые были заданы в качестве домашней работы. Таким образом, для успешной подготовки к контрольным работам необходимо научиться самостоятельно воспроизводить решения разобранных на занятиях задач и задач домашних заданий в соответствии с рекомендациями для подготовки домашнего задания, приведенными выше.

Подготовка к устному опросу. Устный опрос проводится с целью проверить, как на данном этапе обучения усвоен лекционный материал и/или материал, отведённый на самостоятельное изучение. Рекомендации по изучению соответствующих материалов приведены выше. При подготовке следует иметь в виду, что во время устного опроса:

- нужно уметь сформулировать определения изученных величин, понятий и т.д.;
- нужно уметь сформулировать изученные законы, теоремы, утверждения, постулаты и т.д.,
- по каждой теме или подтеме нужно уметь вкратце словами раскрыть суть того, что в ней излагается;

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 03.04.02 "Физика" и магистерской программе "Теоретическая и математическая физика".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.4 Методы расчетов из первых принципов

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика
Профиль подготовки: Теоретическая и математическая физика
Квалификация выпускника: магистр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Основная литература:

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов [Электронный ресурс] : учеб. пособие ? Электрон. дан. ? Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. ? 522 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>. ? Загл. с экрана.
2. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учеб. пособие ? Электрон. дан. ? Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. ? 387 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94102>. ? Загл. с экрана.
3. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] ? Электрон. дан. ? Санкт-Петербург : Лань, 2017. ? 428 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92941>. ? Загл. с экрана.

Дополнительная литература:

1. Блохинцев, Д.И. Основы квантовой механики [Электронный ресурс] : учеб. пособие ? Электрон. дан. ? Санкт-Петербург : Лань, 2004. ? 672 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/619>. ? Загл. с экрана.
2. Байков, Ю.А. Физика конденсированного состояния [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Ю.А. Байков, В.М. Кузнецов. ? Электрон. дан. ? Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. ? 296 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/70766>. ? Загл. с экрана.
3. Аминова, Р.М. Поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Квантовохимические методы анализа ППЭ: учебное пособие / Р. М. Аминова. ? Казань: Казанский государственный университет, 2009. ? 124 с.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.4 Методы расчетов из первых принципов

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика
Профиль подготовки: Теоретическая и математическая физика
Квалификация выпускника: магистр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)
Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010
Браузер Mozilla Firefox
Браузер Google Chrome
Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC
Kaspersky Endpoint Security для Windows