

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального 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 Б1.В.ДВ.4

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Теоретическая и математическая физика

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Лысогорский Ю.В. , Недопекин О.В.

Рецензент(ы):

Таюрский Д.А.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Таюрский Д. А.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__ г

Регистрационный No

Казань
2017

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) ассистент, к.н. Лысогорский Ю.В. Кафедра общей физики Отделение физики , void2003@gmail.com ; заместитель директора по образовательной деятельности Недопекин О.В. Директорат Института физики Институт физики , Oleg.Nedopekin@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Курс знакомит студентов с современными методами квантовомеханических расчетов из первых принципов свойств материалов и наночастиц

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.4 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 03.04.02 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 1, 2 семестры.

Данная учебная дисциплина включена в раздел ' М2.В.1 Профессиональный' основной образовательной программы 011200.68 Физика и относится к вариативной части. Осваивается

на 1 курсе, 2 семестр.

Для освоения этого курса студенты должны прослушать курс квантовой механики, теории твердого тела. Курс относится к вариативной части и читается магистрам ФСС.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	ориентируется в системе общечеловеческих ценностей и учитывает ценностно-смысловые ориентации различных социальных, национальных, религиозных, профессиональных общностей и групп в российском социуме
ОК-5 (общекультурные компетенции)	осознанием значения гуманистических ценностей для сохранения и развития современной цивилизации; готовностью принять нравственные обязательства по отношению к окружающей природе, обществу и культурному наследию
ОК-7 (общекультурные компетенции)	владеет культурой мышления, способностью к анализу, обобщению информации, постановке целей и выбору путей их достижения, владеет культурой устной и письменной речи
ПК-1 (профессиональные компетенции)	владеет системой лингвистических знаний, включающей в себя знание основных фонетических, лексических, грамматических, словообразовательных явлений и закономерностей функционирования изучаемого иностранного языка, его функциональных разновидностей
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью использовать свободное владение профессионально-профилированными знаниями в области информационных технологий, современных компьютерных сетей, программных продуктов и ресурсов Интернет для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-6 (профессиональные компетенции)	владеет основными особенностями официального, нейтрального и неофициального регистров общения
ПК-7 (профессиональные компетенции)	обладает готовностью преодолевать влияние стереотипов и осуществлять межкультурный диалог в общей и профессиональной сферах общения

В результате освоения дисциплины студент:

1. 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.

2. должен уметь:

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

3. должен владеть:

Пакетом программ вычислений MedeA.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

Проводить квантовомеханические расчеты, владеть пакетом вычислительных программ MedeA.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

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

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

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение. Роль ab-initio моделирования в						

современном технологическом процессе синтеза

1

1-5

5

0

0

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Подходы к описанию квантовомеханических систем. Уравнение Шредингера	1	6-10	5	0	0	
3.	Тема 3. Основы теории функционала плотности.	1	11-13	5	0	0	
4.	Тема 4. Решение уравнения Кона-Шэма. Ограничения теории функционала плотности.	1	14-18	3	0	0	
5.	Тема 5. Дальнейшее развитие ТФП (DFT).	2	1-4	2	1	0	
6.	Тема 6. Введение в MedeA.	2	5-9	4	1	0	
7.	Тема 7. Ab-initio расчеты структур	2	10-13	4	1	0	
8.	Тема 8. Определение различных свойств с помощью программы MedeA.	2	14-18	4	10	0	
9.	Тема 9. Подготовка к экзамену.	2	18	4	5	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	Экзамен
	Итого			36	18	0	

4.2 Содержание дисциплины

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

лекционное занятие (5 часа(ов)):

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

лекционное занятие (5 часа(ов)):

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.

лекционное занятие (5 часа(ов)):

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.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Решение уравнения Кона-Шэма. Метод самосогласованного поля (self consisted 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).

лекционное занятие (2 часа(ов)):

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

практическое занятие (1 часа(ов)):

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

Тема 6. Введение в MedeA.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

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

практическое занятие (1 часа(ов)):

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

Тема 7. Ab-initio расчеты структур

лекционное занятие (4 часа(ов)):

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

практическое занятие (1 часа(ов)):

Изучение программы Automated Convergence. Проведение расчетов на ней. Оптимизация структуры на программе VASP.

Тема 8. Определение различных свойств с помощью программы MedeA.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

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

практическое занятие (10 часа(ов)):

Расчет зонной структуры с помощью программы VASP. Изучение модуля PHONON, расчет дисперсионных кривых. Изучение модуля Transition State Search.

Тема 9. Подготовка к экзамену.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Обсуждение вопросов к экзамену.

практическое занятие (5 часа(ов)):

Обсуждение вопросов к экзамену.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение. Роль ab-initio моделирования в современном технологическом процессе синтеза	1	1-5	подготовка к устному опросу	13	устный опрос
2.	Тема 2. Подходы к описанию квантовомеханических систем. Уравнение Шредингера	1	6-10	подготовка к устному опросу	13	устный опрос
3.	Тема 3. Основы теории функционала плотности.	1	11-13	подготовка к устному опросу	13	устный опрос
4.	Тема 4. Решение уравнения Кона-Шэма. Ограничения теории функционала плотности.	1	14-18	подготовка к устному опросу	13	устный опрос
5.	Тема 5. Дальнейшее развитие ТФП (DFT).	2	1-4	подготовка к устному опросу	15	устный опрос
6.	Тема 6. Введение в MedeA.	2	5-9	подготовка к устному опросу	15	устный опрос
7.	Тема 7. Ab-initio расчеты структур	2	10-13	подготовка к устному опросу	15	устный опрос
8.	Тема 8. Определение различных свойств с помощью программы MedeA.	2	14-18	подготовка к устному опросу	15	устный опрос
9.	Тема 9. Подготовка к экзамену.	2	18	подготовка к устному опросу	14	устный опрос
	Итого				126	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Лекции по теоретическим основам квантовомеханических расчетов. Самостоятельная работа студентов под контролем преподавателя на компьютерах.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

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

устный опрос , примерные вопросы:

примерные вопросы: Роль ab-initio моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.

Тема 2. Подходы к описанию квантовомеханических систем. Уравнение Шредингера

устный опрос , примерные вопросы:

примерные вопросы: 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.

устный опрос , примерные вопросы:

Уравнение Кона - Шэма (Kohn-Sham). Приближение локальной электронной плотности (LDA). Обобщенное градиентное приближение (GGA). Гибридный функционал

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

устный опрос , примерные вопросы:

Решение уравнения Кона-Шэма. Метод самосогласованного поля. 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).

устный опрос , примерные вопросы:

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

Тема 6. Введение в MedeA.

устный опрос , примерные вопросы:

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

Тема 7. Ab-initio расчеты структур

устный опрос , примерные вопросы:

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.

устный опрос , примерные вопросы:

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.

устный опрос , примерные вопросы:

все вопросы

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Вопрос 1. Теория

Подготовка по

- Займан. "Электроны и фононы"

- Ашкрофт Мермин. "Физика твердого тела"

- Киттель. "Элементарная физика твердого тела"

- В. Г. Цирельсон "КВАНТОВАЯ ХИМИЯ МОЛЕКУЛЫ, МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ И ТВЕРДЫЕ ТЕЛА"

1. Модель свободных электронов. Влияние периодической решетки. Теорема Блоха.
2. Общие замечания о теореме Блоха. Зона Бриллюэна. Структура зон и поверхность Ферми.
3. Зонная теория твердых тел. Зоны Бриллюэна.
4. Кулоновское взаимодействие. Обмен и корреляция.

5. Динамические свойства электрона. Эффективная масса.
6. Приближение Борна-Оппенгеймера.
7. Кристаллическая решетка. Обратная решетка. Координационное число. Примитивная (элементарная ячейка) и условная элементарная ячейка.
8. Общие свойства колебаний решетки. Гармоническое приближение. Нормальные моды и фононы.
9. Плотность нормальных мод (плотность фононных уровней). Общее выражение для теплоемкости решетки.
10. Теплоемкость решетки и спектр частот. Удельная теплоемкость. Закон Дюлонга-Пти.
11. Модель Дебая и Эйнштейна для теплоемкости.
12. Поверхностные эффекты. Работа выхода. Контактная разность потенциалов. Барьер Шоттки.
13. Взаимодействие Ван-дер-Ваальса.
14. Поверхность потенциальной энергии. Переходные состояния. Энергетический барьер.

Вопрос 2. Теория функционала плотности

Подготовка по

- А.М. Сатанин "Введение в теорию функционала плотности"

- В. Г. Цирельсон "КВАНТОВАЯ ХИМИЯ МОЛЕКУЛЫ, МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ И ТВЕРДЫЕ ТЕЛА"

1. Многоэлектронные системы. Приближение невзаимодействующих электронов. Приближение Хартри-Фока. Обмен и корреляция
2. Проблема вычисления многоэлектронной волновой функции. Системы с несколькими степенями свободы: молекула водорода. Катастрофа ван флека: природа "экспоненциальной ямы".
3. Метод функционала плотности. Метод Томаса-Ферми: пример функционала плотности. Теоремы Кона-Хоэнберга
4. Модельная (вспомогательная) система. Вариационный принцип Кона-Хоэнберга
5. Уравнение Кона-Шэма. Обменно-корреляционная энергия
6. Метод решения уравнения Кона-Шэма
7. Классификация функционалов (LDA, GGA, metaGGA, VdW, Hybrid)

Вопрос 3. Практика

1. Метода расчета энергии. Магнитные и немагнитные структуры. Магнитный порядок(VASP)
2. Метод структурной оптимизации (VASP)
3. Метод расчета констант упругости (MT)
4. Метод расчета частот колебаний (PHONON)
5. Метод поиска переходных состояний (Transition State Search)
6. Метод ab initio молекулярной динамики (VASP)
7. Метод расчета зонной структуры и плотности электронных состояний (VASP)
8. Метод расчета оптических спектров (VASP)
9. Метод расчета градиентов электрического поля (VASP)
10. Метод расчета работы выхода электрона (VASP).
11. Метод расчета энергии адсорбции молекул/атомов на поверхность. (VASP)
12. Метод расчета энергии формации кристаллов. (VASP)
13. Метода расчета энергетического выхода химической реакции. (VASP)

7.1. Основная литература:

1) Аминова, Р.М. Поверхности потенциальной энергии молекулярных систем.

Квантовохимические методы анализа ППЭ: учебное пособие / Р. М. Аминова. ? Казань:

Казанский государственный университет, 2009. ?124 с.

2) Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов. Москва БИНОМ. Лаборатория знаний 2012. - 525 с.

<http://e.lanbook.com/view/book/3150/>

3) Майерб И. Избранные главы квантовой химии.- М.: Бинум. Лаборатория знаний, 2014. -383с. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=50535

7.2. Дополнительная литература:

- Займан. 'Электроны и фононы'

- Ашкрофт Мермин. 'Физика твердого тела'

- Киттель. 'Элементарная физика твердого тела'

- А.М. Сатанин 'Введение в теорию функционала плотности'

7.3. Интернет-ресурсы:

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/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Методы расчетов из первых принципов" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 7 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в

сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

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

Автор(ы):

Недопекин О.В. _____

Лысогорский Ю.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Таюрский Д.А. _____

"__" _____ 201__ г.