

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: 2017

## 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-6	способностью использовать знания современных проблем и новейших достижений физики в научно-исследовательской работе
ПК-3	способностью принимать участие в разработке новых методов и методических подходов в научно-инновационных исследованиях и инженерно-технологической деятельности

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.7 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 семестре.

### 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 2 зачетных(ые) единиц(ы) на 72 часа(ов).

Контактная работа - 24 часа(ов), в том числе лекции - 12 часа(ов), практические занятия - 0 часа(ов), лабораторные работы - 12 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 48 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 1 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	4	0	0	4
2.	Тема 2. Подходы к описанию квантовомеханических систем. Уравнение Шредингера	1	2	0	0	4
3.	Тема 3. Основы теории функционала плотности.	1	2	0	0	4
4.	Тема 4. Решение уравнения Кона-Шэма. Ограничения теории функционала плотности.	1	2	0	2	4
5.	Тема 5. Дальнейшее развитие ТФП (DFT).	1	2	0	2	4
6.	Тема 6. Введение в MedeA.	1	0	0	2	6
7.	Тема 7. Ab-initio расчеты структур	1	0	0	2	6
8.	Тема 8. Определение различных свойств с помощью программы MedeA.	1	0	0	4	6
9.	Тема 9. подготовка к зачету	1	0	0	0	10
	Итого		12	0	12	48

##### 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). Метод Хартри-Фока. Базисные наборы волновых функций (локальный базис Попла, слэтеровские орбитали, гауссовы орбитали и базис плоских волн).

Приближение ортогонализированных плоских волн. Метод псевдопотенциалов.

###### Тема 3. Основы теории функционала плотности.

Модель Томаса - Ферми. Теоремы Хоэнберга - Кона. Уравнение Кона - Шэма (Kohn-Sham). Приближение локальной электронной плотности (LDA), Приближение локальной спиновой плотности, обобщенное градиентное приближение (GGA), приближение с градиентом кинетической энергии mGGA, гибридный функционал (hybrid).

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

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

Ограничения теории функционала плотности: переходные элементы, проблема ширины запрещенной зоны для оксида железа, отсутствие сильных корреляций и сил Ван-дер-Ваальса, ошибки в расчетах параметров

решетки, когезионной энергии.

#### **Тема 5. Дальнейшее развитие ТФП (DFT).**

Модель Хаббарда. Модель локального отталкивания Хаббарда (LSDA+U), Гибридный функционал (HSE0, PBE0,...), дважды гибридный функционал, время зависимый функционал локальной плотности. Включение взаимодействия Ван дер Вальса. Молекулярная динамика Car-Parrinello. Расчет фонноного спектра кристалла.

#### **Тема 6. Введение в MedeA.**

Интерфейс программы MedeA. Доступные вычислительные модули. Архитектура всего комплекса. Сервер работ. Сервер задач. Построитель молекул, построитель кристаллов. Симметрия кристаллов. Доступные базы данных кристаллических структур. Построение суперячейки. Построение интерфейса между различными структурами.

#### **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. Вычисление под действием внешнего давления и электрического поля.

#### **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 зачету**

Написание отчетов по проделанным вычислениям и их обсуждение для интерпретации полученных результатов. Сравнение различных методов вычислений их применимости к рассмотренным системам. Обсуждение вопросов к зачету с преподавателем и изучение методических пособий и литературы, подготовка к сдаче зачета.

### **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

Сайт MedeA - <http://materialsdesign.com/>

база данных свойств материалов - [http://mits.nims.go.jp/index\\_en.html](http://mits.nims.go.jp/index_en.html)

сайт VASP - <https://www.vasp.at/>

### **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 (модуля).

### 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)

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	<p>Цель лекции: организация целенаправленной познавательной деятельности студентов по овладению программным материалом учебной дисциплины. Важным критерием в работе с лекционным материалом является подготовка студентов к сознательному восприятию преподаваемого материала. При подготовке студента к лекции необходимо, накануне лекции просматривание записей предыдущей лекции для восстановления в памяти ранее изученного материала; ознакомление с заданиями для самостоятельной работы, включенными в программу, подбор литературы. Внимательно слушающий студент напряженно работает - анализирует излагаемый материал, выделяет главное, обобщает с ранее полученной информацией и кратко записывает. Конспект лекции позволяет ему обработать, систематизировать и лучше сохранить полученную информацию с тем, чтобы в будущем он смог восстановить в памяти основные, содержательные моменты. В конспекте лекции обязательно записываются название темы лекции, основные вопросы плана, рекомендованная литература. Текст лекции должен быть разделен в соответствии с планом. С окончанием лекции работа над конспектом не может считаться завершенной. Нужно еще восстановить отдельные места, проверить, все ли понятно, уточнить что-то на консультации и т.п., с тем чтобы конспект мог быть использован в процессе подготовки к семинарам, практическим занятиям, зачету для дальнейшего изучения тем.</p>

Вид работ	Методические рекомендации
лабораторные работы	<p>При проведении лабораторных работ:</p> <p>1 . Изучение теоретической части, работа с литературой. К изучению теоретической части необходимо приступать после индивидуальной беседы с преподавателем. Преподаватель указывает положения теории, на которые надо обратить повышенное внимание. В ряде случаев преподаватель может порекомендовать к изучению разделы смежных тем.</p> <p>2. Знакомство с программой. Знакомство с программой следует начинать с плана работы, который должен содержать следующие минимальные позиции:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Назначение</li> <li>- Основные технические характеристики</li> <li>- Принцип действия по блок-схеме</li> <li>- Работа с программой.</li> </ul> <p>Изучение описания программы лучше проводить, находясь непосредственно перед компьютером.</p> <p>3. Проведение моделирования. После знакомства с программой, внимательно прочитать в методическом пособии весь раздел с указаниями по проведению моделирования. Строго следуя этим указаниям, по пунктам, задать начальные значения параметров и занести полученные результаты файлы. Оценить реальность полученных результатов.</p> <p>4. Анализ полученных результатов. Окончив обработку данных, необходимо провести анализ полученных результатов. Анализ заключается в соотнесении их качественным и количественным теоретическим оценкам и определении погрешностей. При обнаружении несоответствия полученных результатов выводам теории, повторить измерения и найти допущенную ошибку.</p> <p>6. Оформление отчета. А) При оформлении отчета по лабораторной работе с помощью компьютера необходимо придерживаться рекомендаций к оформлению отчетов по научно-исследовательской работе. Отчет должен включать титульный лист с указанием</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Организации, в которой выполнялась лабораторная работа</li> <li>- Названия лабораторной работы</li> <li>- Фамилии и номера группы исполнителя</li> <li>- Фамилии преподавателя.</li> </ul> <p>Далее следует изложение конечных результатов в виде графиков и, при необходимости, таблиц. Весь материал должен быть расположен строго по пунктам задания. Каждый график должен иметь номер и подпись к рисунку. Каждый раздел должен заканчиваться очень кратким выводом. В конце отчета необходимо поместить раздел 'Заклучение' с общим выводом по всем результатам работы.</p>

Вид работ	Методические рекомендации
самостоятельная работа	<p>Цель самостоятельной работы - закрепление и углубление полученных знаний и навыков, а также формирование представлений об основных понятиях и разделах курса, и приобретении новых знаний. Рекомендуются следующие виды самостоятельной работы: изучение материала, вынесенного на самостоятельную проработку; работа с лекционным материалом, предусматривающая проработку конспекта лекций и учебной литературы; поиск (подбор) и обзор литературы и электронных источников информации по курсу, подготовка к практическим занятиям; подготовка к лабораторным работам; подготовка к зачету.</p> <p>Можно выделить несколько видов самостоятельной работы студентов при изучении дисциплины.</p> <p>Разбор и усвоение лекционного материала. После каждой лекции студенту следует внимательно прочитать и разобрать конспект, при этом:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Понять все математические выкладки и лежащие в их основе физические положения и допущения; воспроизвести все выкладки самостоятельно, не глядя в конспект.</li> <li>- Выполнить или доделать выкладки, которые лектор предписал сделать самостоятельно (если таковые имеются).</li> <li>- Если лектор предписал разобрать часть материала более подробно самостоятельно по доступным письменным или электронным источникам, то необходимо своевременно это сделать.</li> <li>- 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.</li> </ul> <p>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.</p>
зачет	<p>Цель зачета - выявить и оценить знания, практические умения и навыки обучающихся за курс дисциплины. Зачет проводится путем собеседования основываясь на количестве и качестве сданных в течении семестра лабораторных работ. Если студент в течении семестра сдал необходимое количество лабораторных работ на отлично и хорошо, то он получает зачет, если же количество сданных работ меньше необходимого, то проводится собеседование в соответствии с разработанными заданиями. В качестве задания может выступать подробное рассмотрение теоретического вопроса, решение практической задачи. Для подготовки к зачету на кафедре имеется перечень вопросов, охватывающий весь программный материал дисциплины. В процессе подготовки к зачету обучающимся необходимо пользоваться лекционными записями и рекомендованной учебной литературой. Разрешается использование иного дополнительного материала, имеющегося у обучающегося. Изучая тематический материал, для обучающихся основополагающим является выделение основных положений, их осмысление и практическое применение.</p>

#### 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.7 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: 2017

**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.7 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: 2017

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