

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. Минзарипов Р.Г.

"\_\_" \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Программа дисциплины**

Современные методы ab initio расчетов в физике конденсированного состояния М2.В.1

Направление подготовки: 011200.68 - Физика

Профиль подготовки: Физика сложных систем

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Таюрский Д.А.

**Рецензент(ы):**

-

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой:

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No

Казань  
2014

## 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) заместитель директора института физики Таюрский Д.А. Директорат Института физики Институт физики, Dmitry.Tayurskii@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 "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:

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. Структура и содержание дисциплины/ модуля**

Общая трудоемкость дисциплины составляет зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины 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 структур.	2	1	0	0	0	
2.	Тема 2. Уравнение Шредингера. Приближения Борна- Оппенгеймера. Теорема Хелмманна - Фейнмана (Hellmann-Feynman theorem) ?Базисные наборы волновых функций (локальный базис Попла и базис плоских волн). Приближения. Псевдопотенциалы.	2	2	0	0	0	
3.	Тема 3. ?Основы теории функционала плотности. Уравнение Кона - Шэма (Kohn-Sham). Приближение локальной электронной плотности (LDA) , обобщенное градиентное приближение (GGA), гибридный функционал (hybrid).	2	3	0	0	0	
4.	Тема 4. 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.	2	4	0	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	
5.	Тема 5. Дальнейшее развитие ТФП (DFT): Модель локального отталкивания Хаббарда (LSDA+U) Гибридный функционал (HSE0, PBE0,...)	2	5	0	0	0	
6.	Тема 6. Введение в MedeA Интерфейс программы MedeA. Архитектура всего комплекса. Сервер задач. Построитель молекул, построитель кристаллов.	2	6-9	0	0	0	
7.	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	2	10-14	0	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	
8.	Тема 8. Свойства 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	2	15-18	0	0	0	
9.	Тема 9. Подготовка к экзамену	2	19	0	0	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	экзамен
	Итого			0	0	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

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

**Тема 2. 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. 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): 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. Свойства 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**

## **5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения**

Лекции по теоретическим основам квантовомеханических расчетов. Самостоятельная работа студентов под управлением 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 структур.**

**Тема 2. Уравнение Шредингера. Приближения Борна-Оппенгеймера. Теорема Хелмманна - Фейнмана (Hellmann-Feynman theorem) ?Базисные наборы волновых функций (локальный базис Поппла 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. 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): 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. Свойства 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**

**Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к экзамену:

Приложение 1

## **7.1. Основная литература:**

Методическое пособие Пакет программ компьютерного дизайна материалов MedeA

## **7.2. Дополнительная литература:**

## **7.3. Интернет-ресурсы:**

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану**

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011200.68 "Физика" и магистерской программе Физика сложных систем .



Автор(ы):

Таюрский Д.А. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.