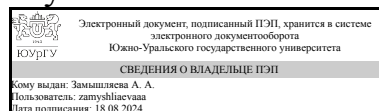


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Институт естественных и точных
наук

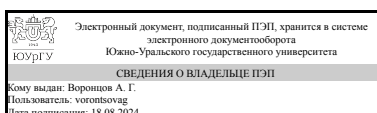


А. А. Замышляева

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

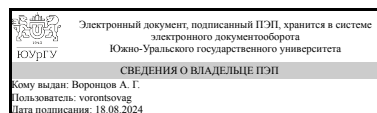
дисциплины 2.1.25.1 Специальная дисциплина
для научной специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния
форма обучения очная
кафедра-разработчик Физика наноразмерных систем

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. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Знать:

Строение вещества. 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. 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.

Уметь:

Применять существующие пакеты компьютерного моделирования (WIEN-2k, SIESTA, LAMMPS) для расчетов структуры, электронных, колебательных и термодинамических характеристик материалов. Применять современные пакеты 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).

Владеть:

Методами моделирования атомной и электронной структуры конденсированных систем, реализованных в пакетах компьютерного моделирования (WIEN-2k, SIESTA, LAMMPS).

3. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Дисциплина относится к Образовательному компоненту программы аспирантуры.

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 ч.

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		7
Общая трудоёмкость дисциплины	72	72
<i>Аудиторные занятия:</i>	36	36
Лекции (Л)	36	36
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	36	36
Подготовка к экзамену	6	0
Изучение тем вынесенных на самостоятельную проработку	10	0
Изучение руководств по использованию пакетов программ компьютерного моделирования	10	0
Проведение моделирования свойств металлического кристалла	10	0
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
1	Основы компьютерного моделирования материалов	12	12	0
2	Методы расчёты электронной структуры и пакеты программ для их реализации	14	14	0
3	Электронные свойства низкоразмерных проводников и наноконтактов в современных электронных устройствах	10	10	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	2
6	1	Приближения для обменно-корреляционного функционала. Л. 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	2
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 Ландауэра для идеального контакта.	2
16	3	Метод функций Грина в методе сильной связи	2
17	3	Формула Ландауэра 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. Самостоятельная работа аспиранта

Выполнение СРС

Вид работы и содержание задания	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц)	Кол-во часов
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. Соболев ; 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/	10
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)	6
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. Воронцов. - М.: Физматлит, 2011. - 196 с. (главы 1-3)	10
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

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. Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.1. Паспорт оценочных средств

Наименование разделов дисциплины	Контролируемая компетенция ЗУНы	Вид контроля (включая текущий)	№№ заданий
Методы расчёты электронной структуры и пакеты программ для их реализации		Самостоятельная работа по моделированию свойств материала с помощью пакетов программ WIEN-2k или SIESTA	1
Все разделы		экзамен	2
Все разделы		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 неорганических 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. Методические указания для самостоятельной работы студентов
2. 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

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Методические указания для самостоятельной работы студентов
2. 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

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
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	Заводинский, 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 (1a)	экран, проектор, компьютерное оборудование для лекций в виде электронных презентаций