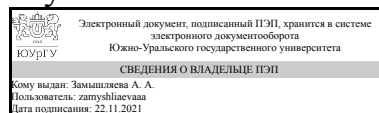


# ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:  
Директор института  
Институт естественных и точных  
наук



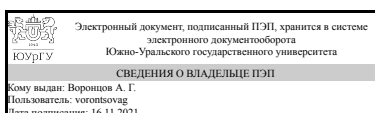
А. А. Замышляева

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

**дисциплины П.1.В.06.01 Массивные вычисления и компьютерное моделирование в современной физике**  
**для направления 03.06.01 Физика и астрономия**  
**уровень аспирант тип программы**  
**направленность программы**  
**форма обучения очная**  
**кафедра-разработчик Физика наноразмерных систем**

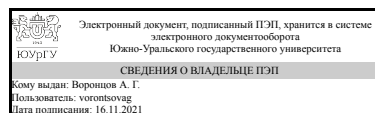
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия, утверждённым приказом Минобрнауки от 30.07.2014 № 867

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. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (ЗУНы)
ПК-2.1 умением проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твердом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях	Знать: Теоретические основы атомистических расчетов физических свойств конденсированных сред и материалов, сопоставление результатов моделирования с термодинамическими характеристиками и данными экспериментальных методик исследования. Методику применения существующих пакетов

	<p>компьютерного моделирования (WIEN-2k, SIESTA, LAMMPS, ABINIT) для расчетов структуры, электронных, колебательных и термодинамических характеристик материалов.</p> <p>Уметь: Проводить компьютерное моделирование физических свойств материалов с использованием одного из пакетов для атомистического моделирования (WIEN-2k, SIESTA, LAMMPS, ABINIT), объяснять строение и свойства материалов с позиций квантовой химии и физики твердого тела. Прогнозировать качественные и количественные характеристики структуры, механических, колебательных, магнитных и электронных свойств конденсированных систем, объемных, поверхностных и дефектных состояний реальных кристаллов; проводить на основе результатов моделирования интерпретацию имеющихся экспериментальных данных о материалах.</p> <p>Владеть: навыками решения практических задач физического материаловедения путем использования методов компьютерного моделирования материалов.</p>
<p>ПК-3.1 умением проводить исследования физических явлений, составляющих основу для разработок и создания новых электронных приборов и устройств</p>	<p>Знать: Основы физических явлений, используемых для создания и разработки новых электронных приборов и устройств, дать их математическое описание, устанавливать связи между явлениями. Теоретические и практические основы атомистических расчетов физических свойств конденсированных сред и материалов, сопоставление результатов моделирования с термодинамическими характеристиками и данными экспериментальных методик исследования. Методику применения существующих пакетов компьютерного моделирования (WIEN-2k, SIESTA, LAMMPS, ABINIT) для расчетов структуры, электронных, колебательных и термодинамических характеристик материалов. Идеи Ландау об элементарных возбуждениях, квазичастицах. Особенности низкоразмерных проводников, природу баллистической проводимости в наноконтактах, формулу Ландауэра.</p> <p>Уметь: Объяснять строение и свойства материалов с позиций квантовой химии и физики твердого тела. Проводить компьютерное моделирование физических свойств материалов с использованием одного из пакетов для атомистического моделирования (WIEN-2k, SIESTA, LAMMPS, ABINIT). Прогнозировать качественные и количественные характеристики структуры, механических, колебательных, магнитных и электронных свойств конденсированных систем, объемных,</p>

	поверхностных и дефектных состояний реальных кристаллов; проводить на основе результатов моделирования интерпретацию имеющихся экспериментальных данных о материалах.
	Владеть:современными компьютерными технологиями исследования физических свойств кристаллических и конденсированных систем на основе одного из применяемых в мировой практике компьютерных пакетов программ SIESTA, WIEN-2k, LAMMPS, ABINIT, ESPRESSO, навыками решения практических задач физического материаловедения, возникающих при разработке новых инновационных технологий, путем использования методов компьютерного моделирования материалов.

### 3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	Научно-исследовательская деятельность (3 семестр)

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	Знать:современные библиографические и реферативные базы данных и методы поиска публикаций в них Уметь:осуществлять поиск научной информации в библиотеке и сети интернет Владеть:навыками сбора, обработки и анализа научной информации Знать:основы организации научной деятельности в области компьютерного материаловедения Уметь:получать доступ к распределенным вычислительным ресурсами, обрабатывать полученные данные Владеть:методами работы на распределенных вычислительных ресурсах, обработки и представления результатов

### 4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 ч.

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		2

Общая трудоёмкость дисциплины	108	108
<i>Аудиторные занятия:</i>	40	40
Лекции (Л)	40	40
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0
Лабораторные работы (ЛР)	0	0
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	68	68
Изучение тем вынесенных на самостоятельную проработку	10	10
Изучение руководств по использованию пакетов программ компьютерного моделирования	15	15
Проведение моделирования свойств металлического кристалла	20	20
Подготовка к экзамену	23	23
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	ЛР
1	Основы компьютерного моделирования материалов	14	14	0	0
2	Методы расчёты электронной структуры и пакеты программ для их реализации	16	16	0	0
3	Электронные свойства низкоразмерных проводников и наноконтактов в современных электронных устройствах	10	10	0	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	4
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	4
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 Ландауера для идеального контакта.	2
16	3	Метод функций Грина в методе сильной связи	2
17	3	Формула Ландауера 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. Лабораторные работы

Не предусмотрены

## 5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС		
Вид работы и содержание задания	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц)	Кол-во часов
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)	23
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. Соколов ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Компьютер. моделирование и нанотехнологии ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2016. - (страницы 1 - 112). 2. User's guide "SIESTA" <a href="https://departments.icmab.es/leem/siesta/Documentation/index.html">https://departments.icmab.es/leem/siesta/Documentation/index.html</a> 3. User's guide "WIEN-2k" <a href="http://susi.theochem.tuwien.ac.at/">http://susi.theochem.tuwien.ac.at/</a>	15
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
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.	20

## 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. Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

### 7.1. Паспорт фонда оценочных средств

Наименование разделов дисциплины	Контролируемая компетенция ЗУНы	Вид контроля (включая текущий)	№№ заданий
Методы расчёты электронной структуры и пакеты программ для их реализации	ПК-2.1 умением проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твёрдом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях	Самостоятельная работа по моделированию свойств материала с помощью пакетов программ WIEN-2k или SIESTA	1
Все разделы	ПК-2.1 умением проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твёрдом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях	экзамен	2
Все разделы	ПК-3.1 умением проводить исследования физических явлений, составляющих основу для разработок и создания новых электронных приборов и устройств	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 неорганич. 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. 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
2. Методические указания для самостоятельной работы студентов

*из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:*

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. - 112
2. Методические указания для самостоятельной работы студентов

**Электронная учебно-методическая документация**

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной	Библиографическое описание
---	----------------	------------------------------------	----------------------------

		форме	
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: <a href="http://e.lanbook.com/book/156">http://e.lanbook.com/book/156</a>
2	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Завадинский, В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2013. — 176 с. — Режим доступа: <a href="http://e.lanbook.com/book/59650">http://e.lanbook.com/book/59650</a>
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: <a href="https://e.lanbook.com/book/5262">https://e.lanbook.com/book/5262</a>

## 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 (1а)	экран, проектор, компьютерное оборудование для лекций в виде электронных презентаций