

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)»**

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы  
электроники, фотоники и  
молекулярной физики  
А.С. Батурин**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Методы расчета электронной структуры материалов
<b>по направлению:</b>	Материаловедение и технологии материалов
<b>профиль подготовки:</b>	Перспективные функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
<b>курс:</b>	1
<b>квалификация:</b>	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 30 час.

Самостоятельная работа: 75 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составили:

К.С. Фиданян, phd (к.ф.-м.н.)

В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 12.02.2024

## Аннотация

Курс знакомит студентов с методами расчёта электронной структуры материалов, начиная с простейших иллюстративных задач, таких как численное решение одномерного уравнения Шрёдингера, и заканчивая методами, которые имеют практическую значимость, такими как теория функционала плотности (DFT). В результате освоения курса у студентов сформируется понимание общих принципов построения программы для расчётов, появится навык написания компьютерных программ на языке Python для проведения расчётов электронной структуры и визуализации результатов.

### 1. Цели и задачи

#### Цель дисциплины

- по результатам курса обучающиеся должны понимать физические принципы, заложенные в различные модели для описания многоэлектронных систем, быть в состоянии программировать некоторые такие модели и правильно интерпретировать результаты электронно-структурных расчётов.

#### Задачи дисциплины

- ознакомление обучающихся с различными методами расчета электронной структуры атомов, молекул и твёрдых тел. Выработка понимания преимуществ, недостатков и области применимости каждого метода, выработка навыка планирования архитектуры расчётной программы и написания таких программ.

### 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- теоретические основания различных методов расчёта электронной структуры: метода Хартри, Хартри-Фока, теории функционала плотности (DFT).

уметь:

- реализовывать упомянутые выше методы расчета с использованием языка программирования Python;
- находить теоретически или путем тестов оптимальные параметры расчётов;
- правильно интерпретировать результаты расчетов.

владеть:

- практическими навыками использования упомянутых выше методов;
- теоретическим аппаратом, позволяющим оценить границы применимости различных методов и выбрать корректный метод для решения конкретной задачи.

### 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

#### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Приближение Борна-Оппенгеймера, поверхность потенциальной энергии			2	8
2	Одномерное уравнение Шрёдингера		2	2	8
3	Вариационный метод		4	4	5
4	Приближение самосогласованного поля. Метод Хартри / Хартри-Фока		4	2	8
5	Теория функционала плотности		4	4	8
6	Твердое тело		2	4	8
7	Псевдопотенциалы		2	2	6
8	Электронные свойства твёрдых тел		4	4	8
9	Гармоническое приближение		4	4	8
10	Интеграция электронно-структурных расчётов с другими инструментами		4	2	8
Итого часов			30	30	75
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

##### 1. Приближение Борна-Оппенгеймера, поверхность потенциальной энергии

Введение. Моделирование системы из ядер и электронов. Различные системы координат для представления атомистической системы. Приближение Борна-Оппенгеймера. Поверхность потенциальной энергии. Границы применимости ПБО, примеры неадиабатических эффектов.

##### 2. Одномерное уравнение Шрёдингера

Гармонический осциллятор. Система атомных единиц. Точное решение уравнения Шрёдингера. Квантовая механика и численные решения: некоторые наблюдения. Сеточное представление задачи, патологическое асимптотическое поведение решения. Метод Нумерова. Уравнение Шрёдингера для сферически симметричного потенциала. Сферические координаты, особенности перехода из декартовой в сферическую систему координат. Лапласиан в сферических координатах. Потенциал Кулона, сингулярность в начале координат. Методы устранения сингулярности. Границы применимости одномерного представления для расчёта электронной структуры.

##### 3. Вариационный метод

Вариационный принцип. Демонстрация вариационного принципа. Преимущества вариационного метода. Энергия основного состояния. Базисные функции. Базисы гауссовых и слэтеровских орбиталей, базис плоских волн, их преимущества и недостатки. Особенности неортогональных наборов базисных функций.

Написание программы для расчёта эл. структуры вариационным методом.

#### 4. Приближение самосогласованного поля. Метод Хартри / Хартри-Фока

Многоэлектронная задача. Экспоненциальный рост сложности с ростом числа электронов. Метод среднего поля. Метод Хартри. Уравнения Хартри. Собственные значения и энергия Хартри. Самосогласованное поле. Численная реализация метода Хартри для радиальной задачи. Некорректность метода Хартри. Фермионные свойства электронов. Детерминант Слэтера. Метод Хартри-Фока. Кулоновский и обменный потенциал. Корреляционная энергия. Атом гелия. Матричные элементы гамильтониана. Численная реализация метода Хартри-Фока для атома гелия в гауссовом базисе.

#### 5. Теория функционала плотности

Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма, их отличие от уравнений Хартри. Приближённые обменно-корреляционные функционалы. Приближение локальной плотности (LDA), приближение обобщённых градиентов (GGA), потенциал Пердью-Бёрка-Эрнцерхофа (PBE). Гибридные функционалы.

#### 6. Твёрдое тело

Идеальный кристалл: основные свойства и определения. Периодические граничные условия. Решётка Бравэ, базис векторов трансляции. Точечные и пространственные группы симметрии. Обратное пространство, сопряженный базис. Преобразование Фурье. Теорема Блоха, блоховские функции. Решение задачи для свободного электрона в периодических граничных условиях. Решение электронной задачи в потенциале кристалла. Базис плоских волн. Быстрое преобразование Фурье.

#### 7. Псевдопотенциалы

Кулоновский потенциал и базис плоских волн. Глубокие электронные уровни и валентная оболочка. Псевдопотенциалы.

#### 8. Электронные свойства твёрдых тел

Дисперсия электронных уровней. Электронные зоны, свойства металлов, полупроводников и диэлектриков. Примесные уровни, допирование, полупроводники p- и n-типа. Плотность электронных состояний, её роль в контексте сканирующей туннельной микроскопии. Оптические свойства.

#### 9. Гармоническое приближение

Гармоническое приближение поверхности потенциальной энергии. Колебания в молекулах. Колебания решетки в твёрдом теле, фононы. Связь фононов с теплопроводностью и электропроводностью. Выход за пределы гармонического приближения: приближение 3-го порядка. Молекулярная динамика как средство расчёта колебательных свойств.

#### 10. Интеграция электронно-структурных расчётов с другими инструментами

Современные программные пакеты для электронно-структурных расчётов. Пакеты VASP, Quantum Espresso. Современные пакеты для расчёта молекулярной динамики: LAMMPS, i-PI. Интерфейсы сопряжения пакетов для решения атомной и электронной задач. Пакет ASE.

### 5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

учебная аудитория, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

## 6. Перечень рекомендуемой литературы

### Основная литература

Литература выдается на кафедре:

1. Сатанин А.М. Введение в теорию функционала плотности. Учебно-методическое пособие. Нижний Новгород, 2009, 64 с.
2. Киселёв В. В. Квантовая Механика. Курс лекций. (Учебное пособие) – М.: МЦНМО, 2009. – 560 с.
3. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель, Пер. с англ. Физматгиз, 1963.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: учебное пособие для вузов. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Физматлит, 2004. – 800 с

### Дополнительная литература

Литература выдается на базовой кафедре:

1. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твёрдого тела (в двух томах) Пер. с англ. А. Михайлова. – М.: Мир, 1979. Т. 1 – 458 с.; Т. 2 – 486 с.
2. Giustino F. Materials Modelling using Density Functional Theory. Properties and Predictions // Oxford University Press, 2014. ISBN 978–0–19–966243–2
3. Giannozzi P. Numerical Methods in Quantum Mechanics (Lecture notes)

## 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Журналы по физике твердого тела (Физика твердого тела, Кристаллография, ЖЭТФ, Письма в ЖЭТФ, Physical Review B, Phys. Rev. Lett., Physica Status Solidi b, и др.), доступные через Internet научные и научно-технические журналы: <http://scitation.aip.org/>, <http://www.sciencemag.org/> электронные конспекты лекций, учебные пособия и сборники задач, разработанные для данного курса.

## 8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Документация к языку программирования Python и его расширению Numpy:

<https://www.python.org>

<https://numpy.org>

## 9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Успешное освоение курса требует самостоятельной работы студента. В программе курса для самостоятельной работы студента над темой отводится минимальное время.

Самостоятельная работа включает в себя:

- проработку учебного материала (по учебной и научной литературе);
- чтение и конспектирование дополнительной литературы;
- подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- подготовку к дифференцированному зачёту.

Руководство и контроль самостоятельной работы студента осуществляется в форме индивидуальных консультаций. Показателем владения материалом служит умение решать задачи. Для формирования умения применять теоретические знания на практике студенту необходимо решать как можно больше задач. При решении задач каждое действие необходимо аргументировать, ссылаясь на рассмотренный ранее теоретический аппарат.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)**

<b>по направлению:</b>	Материаловедение и технологии материалов
<b>профиль подготовки:</b>	Перспективные функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
<b>курс:</b>	<u>1</u>
<b>квалификация:</b>	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

**Разработчики:**

К.С. Фиданян, phd (к.ф.-м.н.)

В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Методы расчета электронной структуры материалов» обучающийся должен:

### знать:

- теоретические основания различных методов расчёта электронной структуры: метода Хартри, Хартри-Фока, теории функционала плотности (DFT).

### уметь:

- реализовывать упомянутые выше методы расчета с использованием языка программирования Python;
- находить теоретически или путем тестов оптимальные параметры расчётов;
- правильно интерпретировать результаты расчетов.

### владеть:

- практическими навыками использования упомянутых выше методов;
- теоретическим аппаратом, позволяющим оценить границы применимости различных методов и выбрать корректный метод для решения конкретной задачи.

## 3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала в конце занятия проверяется способность написать программу по теме занятия. Если занятие не предусматривает написание программ, в начале следующего занятия проводится устный опрос для проверки усвоения материала.

## 4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы к дифференциальному зачету (темы заданий):

1. Написать программу для нахождения методом Нумерова электронных уровней в гармоническом потенциале.
2. Написать программу для нахождения методом Нумерова электронных уровней атома водорода в одномерном сферически симметричном приближении.
3. Написать программу для нахождения электронных уровней атома гелия методом Хартри в одномерном сферически симметричном приближении.
4. Написать программу для нахождения электронных уровней атома гелия методом Хартри с использованием вариационного принципа в гауссовом базисе.
5. Написать программу для нахождения электронных уровней атома гелия методом Хартри-Фока с использованием вариационного принципа.

6. Написать программу для расчёта электронной плотности атома гелия методом теории функционала плотности с обменно-корреляционным функционалом Хартри-Фока в одном из базисов: гауссовы функции, слэтеровы функции, плоские волны.
7. Объяснить любую из вышеперечисленных программ.
8. Объяснить физический смысл электронных дисперсионных кривых в твёрдом теле.
9. Произвести расчёт колебательных свойств кристаллической решётки для заданного преподавателем материала одним из электронно-структурных кодов. Объяснить результаты.
10. Плотность электронных состояний, её роль в контексте сканирующей туннельной микроскопии (опрос).

#### Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

#### 5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Оценка за дифференцированный зачет выставляется по результатам текущего контроля успеваемости (среднее арифметическое всех оценок). Текущий контроль успеваемости проводится путем проверки заданий или опросов по вопросам к дифференцированному зачету.