

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы физики
и исследований им. Ландау
А.В. Рогачев**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Введение в теорию функционала плотности
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра фундаментальной и прикладной физики микро- и наноструктур
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 15 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 15 час.

Самостоятельная работа: 30 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: И.В. Бобкова, д-р физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры фундаментальной и прикладной физики микро- и наноструктур
18.02.2025

Аннотация

Курс знакомит студентов с весьма востребованным в современной физике твердого тела и квантовой химии численным методом – методом теории функционала плотности (ТФП, DFT(англ.)). Данный метод позволяет проводить первопринципные численные расчеты для получения химических и физических свойств соединений и кристаллов. Методы ТФП позволяют исследовать геометрическое строение соединений и кристаллов, энергии связей, границ, адгезии, электронные, фононные спектры кристаллов и многое другое. В рамках курса излагаются теоретические основы метода ТФП (включая предшествующие методы, такие как метод Хартри-Фока), описываются базовые численные алгоритмы, лежащие в основе современных пакетов для проведения вычислений методом ТФП и проводятся практические работы по применению таких пакетов для исследования химических свойств простых соединений, а также химических, механических, электрических и магнитных свойств кристаллов – именно эта область наиболее востребована в физике твердого тела.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Познакомить студентов старших курсов с методом теории функционала плотности и дать базовые навыки по проведению первопринципных расчетов.

Задачи дисциплины

Задачами учебной дисциплины являются: формирование у обучающихся специализированных навыков работы с пакетами для первопринципных расчетов и глубокого понимания алгоритмов и физических процессов, лежащих в основе данных пакетов. Важнейшей задачей курса является практическое применение первопринципных расчетов методом ТФП для исследования различных молекул и кристаллов.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения
	УК-2.2 Способен прогнозировать результат деятельности и планировать последовательность шагов для достижения данного результата. Формирует план-график реализации проекта в целом и план контроля его выполнения
УК-6 Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.2 Оценивает свою деятельность, соотносит цели, способы и средства выполнения деятельности с её результатами
	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук

ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
	ОПК-5.1 Способен работать в коллективе, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
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 в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	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
ПК-3 Способен профессионально работать с	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)

исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области

ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)

ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- квантовомеханические принципы, лежащие в основе метода ТФП (включая теоремы Хознберга-Кона и уравнения Кона-Шэма);
- возможности, ограничения метода ТФП и его место среди всех методов симуляции и моделирования материалов и структур (начиная от точного решения уравнения Шредингера и кончая симуляцией непрерывной среды методом конечных элементов);
- основные методы вычислительной математики, используемые в современных пакетах, реализующих вычисления методом ТФП (диагонализация гамильтониана, проведение быстрого преобразования Фурье, решение уравнений на самосогласованные величины);
- принципы работы с программными пакетами (формирование входных файлов и извлечение необходимой информации из расчетов);
- правила проведения расчетов и верификации результатов (критерии сходимости по полной энергии, по числу k-точек, по энергии обрезки электронных состояний);
- физические и химические величины, которые возможно определять с помощью метода ТФП.

уметь:

- применять программные пакеты для проведения первопринципных расчётов;
- проводить геометрическую оптимизацию молекул и кристаллов;
- вычислять энергии ковалентных, атомных, ионных и металлических связей, а также энергии адгезии;
- рассчитывать наиболее выгодные поверхности терминции кристаллов;
- проводить вычисление колебательных мод молекул;
- проводить вычисления электронных свойств кристаллов, включая электронную плотность состояний и электронный спектр;
- проводить расчет фононных спектров кристаллов;
- определять магнитный момент кристаллов и магнитную анизотропию;
- учитывать ван-дер-ваальсовое взаимодействие (DFTD3) и локальное Хаббардовское отталкивание (DFT+U).

владеть:

- навыками решения задач, основанных на полученных в ходе освоения дисциплины знаниях;
- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернете;
- навыками теоретического анализа реальных задач, связанных с первопринципным изучением физических и химических свойств материалов.

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	Квантовомеханические принципы, лежащие в основе теории функционала плотности	3			4

2	Численные методы, лежащие в основе пакетов, реализующих расчеты методом ТФП	2			4
3	Знакомство с программным обеспечением (вычислительным пакетом)	2			4
4	Исследование отдельных молекул	2		4	4
5	Исследование свойств кристаллических материалов	2		4	4
6	Исследование электронных и фононных спектров кристаллов	2		4	4
7	Исследование магнитных свойств материалов	2		3	6
Итого часов		15		15	30
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

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

Семестр: 2 (Весенний)

1. Квантовомеханические принципы, лежащие в основе теории функционала плотности

Невозможность точного решения уравнения Шредингера для многоэлектронных систем. Приближение Хартри-Фока. Приближение Томаса-Ферми. Теоремы Хоэнберга-Кона и уравнения Кона-Шэма. Виды обменно-корреляционного потенциала. LDA, GGA приближения.

2. Численные методы, лежащие в основе пакетов, реализующих расчеты методом ТФП

Численное решение уравнения Шредингера. Дискретизация пространства и построение матричного гамильтониана. Диагонализация Матриц. Метод быстрого преобразования Фурье. Методы решения уравнений самосогласования.

3. Знакомство с программным обеспечением (вычислительным пакетом)

Знакомство с формализмом конкретных вычислительных пакетов. Установка. Входные файлы. Запуск вычислений. Анализ выходных файлов.

4. Исследование отдельных молекул

Геометрическая оптимизация. Расчет энергии связи. Колебательные степени свободы. Визуализация электронной плотности.

5. Исследование свойств кристаллических материалов

Периодические граничные условия. К-точки. Энергия связи на ячейку. Энергия интерфейса для различных терминаций кристалла.

6. Исследование электронных и фононных спектров кристаллов

Плотность электронных состояний (DOS, PDOS). Симметричные направления в первой зоне Бриллюэна. Электронные спектры кристалла. Запрещенные зоны, плоские зоны, особенности Ван-Хова. Фононные спектры кристалла. Акустические и оптические моды. Поперечные моды ван-дер-ваальсовых кристаллов.

7. Исследование магнитных свойств материалов.

7. Исследование магнитных свойств материалов

Учет спиновой поляризации вещества. Учет спин-орбитального взаимодействия. Неколлинеарные расчеты. Определение магнитного момента на ячейку. Расчет магнитной анизотропии. Хаббардовские поправки (DFT+U).

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

Необходимое оборудование для лекций: компьютер и мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система).

Необходимое программное обеспечение: офисный пакеты Adobe Acrobat, Microsoft Office или аналоги для рефератов и презентаций, пакеты прикладных программ Matlab, Python, Wolfram Mathematica или аналоги (при наличии технической возможности).

Обеспечение самостоятельной работы – доступ в Интернет, базы данных по научной периодике.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Квантовая теория твердых тел [Текст] : учеб. пособие для вузов / Ч. Киттель ; пер. с англ. А. А. Гусева. — М. : Наука, 1967. — 491с.
2. R. G. Parr, and W. Yang, Density Functional Theory of Atoms and Molecules (Oxford University Press, Oxford) 1989.
3. W. Kohn, L. J. Sham. Phys. Rev. A, 140:1133(1965).
4. P. Hohenberg, W. Kohn. Phys. Rev. A, 136, B864(1964).

Дополнительная литература

1. Теоретическая физика [Текст] : в 10 т. Т. 3 : Квантовая механика. Нерелятивистская теория : учеб. пособие для вузов / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под ред. Л. П. Питаевского. — 5-е изд., стереотип. — М. : Физматлит, 2004, 2002. — 808 с.
2. Физика твердого тела [Текст] : в 2 т. Т. 1 / Н. Ашкрофт, Н. Мермин ; пер. с англ. А. С. Михайлова ; под ред. М. И. Каганова. — М. : Мир, 1979. — 399 с.
3. Физика твердого тела [Текст] : в 2 т. Т. 2 : [учеб. пособие для вузов] / Н. Ашкрофт, Н. Мермин ; пер. с англ. К. И. Кугеля, А. С. Михайлова ; под ред. М. И. Каганова. — М. : Мир, 1979. — 424 с.
4. Элементарная физика твердого тела [Текст] : [учеб. пособие для вузов] / Ч. Киттель ; пер. с англ. А. А. Гусева. — М. : Наука, 1965. — 366 с.

Калиткин, Н. Н. Численные методы : учебное пособие / Н. Н. Калиткин ; под редакцией А. А. Самарского. 2-е изд. Санкт-Петербург : БХВ-Петербург, 2015. 1 файл (Учебная литература для вузов) Электронная версия печатной публикации Доступ из локальной сети МФТИ (чтение, печать) Доступ по паролю из сети Интернет (чтение, печать) Полный текст (содержание) ISBN 978-5-9775-2575-6 Текст : электронный

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

<https://www.openmx-square.org/>

<https://www.vasp.at/>

<http://www.gaussian.com/>

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

Стандартное оборудование для мультимедийных презентаций и проведения видеоконференций, компьютерное оборудование для поиска информации и численного моделирования.
Библиотечный фонд МФТИ.

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

Студент, изучающий дисциплину, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

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

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению: Прикладные математика и физика
профиль подготовки: Общая и прикладная физика
Физтех-школа физики и исследований им. Ландау
кафедра фундаментальной и прикладной физики микро- и наноструктур
курс: 1
квалификация: магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен

Разработчик: И.В. Бобкова, д-р физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения
	УК-2.2 Способен прогнозировать результат деятельности и планировать последовательность шагов для достижения данного результата. Формирует план-график реализации проекта в целом и план контроля его выполнения
УК-6 Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.2 Оценивает свою деятельность, соотносит цели, способы и средства выполнения деятельности с её результатами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений

ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
	ОПК-5.1 Способен работать в коллективе, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
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 в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	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
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Введение в теорию функционала плотности» обучающийся должен:

знать:

- квантовомеханические принципы, лежащие в основе метода ТФП (включая теоремы Хоэнберга-Кона и уравнения Кона-Шэма);
- возможности, ограничения метода ТФП и его место среди всех методов симуляции и моделирования материалов и структур (начиная от точного решения уравнения Шредингера и кончая симуляцией непрерывной среды методом конечных элементов);
- основные методы вычислительной математики, используемые в современных пакетах, реализующих вычисления методом ТФП (диагонализация гамильтониана, проведение быстрого преобразования Фурье, решение уравнений на самосогласованные величины);
- принципы работы с программными пакетами (формирование входных файлов и извлечение необходимой информации из расчетов);
- правила проведения расчетов и верификации результатов (критерии сходимости по полной энергии, по числу k-точек, по энергии обрезки электронных состояний);
- физические и химические величины, которые возможно определять с помощью метода ТФП.

уметь:

- применять программные пакеты для проведения первопринципных расчётов;
- проводить геометрическую оптимизацию молекул и кристаллов;
- вычислять энергии ковалентных, атомных, ионных и металлических связей, а также энергии адгезии;
- рассчитывать наиболее выгодные поверхности терминации кристаллов;
- проводить вычисление колебательных мод молекул;
- проводить вычисления электронных свойств кристаллов, включая электронную плотность состояний и электронный спектр;
- проводить расчет фононных спектров кристаллов;
- определять магнитный момент кристаллов и магнитную анизотропию;
- учитывать ван-дер-ваальсовое взаимодействие (DFTD3) и локальное Хаббардовское отталкивание (DFT+U).

владеть:

- навыками решения задач, основанных на полученных в ходе освоения дисциплины знаниях;
- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернете;
- навыками теоретического анализа реальных задач, связанных с первопринципным изучением физических и химических свойств материалов.

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

Полученные знания оцениваются по результатам решения задач, выданных студенту для самостоятельного решения и контрольных вопросов по содержанию курса.

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

Перечень контрольных вопросов и заданий:

1. В чем состоит основное приближение метода ТФП и почему поставленные задачи нельзя решить без него?
2. Какие существуют приближения для обменно-корреляционного потенциала и в чем их суть?
3. Описать суть и вычислительную сложность численных процедур, реализуемых в процессе расчета методом ТФП: решение уравнений Кона-Шема, Fast-Fourier-Transform, электронное уравнение самосогласования.
4. Суть ионного цикла самосогласования.
5. Электронная зонная структура и её связь с плотностью состояний.
6. Метод геометрической оптимизации и нахождения собственных мод
7. Высокосимметричные направления в кристаллах.
8. Вычислить равновесную геометрию и энергию связи для молекулы NH_3 .
9. Определить наиболее выгодную терминацию кристалла железа.
10. Вычислить фононный спектр графена.

Примеры экзаменационных билетов

Билет 1.

1. В чем состоит основное приближение метода ТФП и почему поставленные задачи нельзя решить без него?
2. Фононный спектр графена.

Билет 2.

1. Суть ионного цикла самосогласования.
2. Равновесная геометрия и энергия связи для молекулы NH_3 .

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

Экзамен проводится в форме устного опроса по контрольным вопросам и защиты выполненных обучающимся в течение семестра практических работ. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.