

**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>	Компьютерный практикум по термодинамике конденсированного состояния
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и 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: 30 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: Д.В. Минаков, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 12.02.2024

## Аннотация

Курс посвящен теоретическим основам и практическому применению вычислительных методов для решения различных задач моделирования свойств конденсированного состояния. Рассматриваются основные понятия теории конденсированных сред, подходы к решению задачи описания свойств многочастичных квантово-механических систем, одноэлектронное приближение, метод самосогласованного поля, метод Томаса-Ферми, теория функционала плотности. В процессе обучения будут рассмотрены задачи расчета кривых холодного сжатия, изотерм и ударных адиабат, оценки положения кривых плавления веществ.

### 1. Цели и задачи

#### Цель дисциплины

- знакомство с задачами физики конденсированного состояния, активно исследуемыми в настоящее время, изучение идей и методов, лежащих в основе теоретического описания соответствующих явлений, практика использования современных вычислительных средств для расчета термодинамических свойств материалов.

#### Задачи дисциплины

- получение представлений о круге задач, решаемых в рамках физики конденсированного состояния;
- изучение основных методов расчета электронной структуры и свойств атомов;
- изучения метода функционала плотности и его приложений к задачам физики конденсированного состояния;
- моделирование кристаллических систем методом функционала плотности;
- моделирование жидкости методом квантовой молекулярной динамики;
- расчет различных термодинамических свойств на основе первопринципного моделирования.

### 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 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)

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

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- области существования неидеальной классической и вырожденной плазмы, области применимости предельных приближений;
- методы экспериментальных измерений ударных адиабат;
- основные положения приближения Хартри и Хартри-Фока, общий вид детерминанта Слэтера;
- формулировки теорем Хоэнберга-Кона и Леви-Либа;
- уравнение Кона-Шэма, смысл обменно-корреляционного функционала;
- ограничения псевдопотенциального приближения в рамках метода функционала плотности;
- способы учета вклада ионной подсистемы в расчетах свойств кристаллической и неупорядоченной фазы веществ, основы модели Дебая, квазигармонического приближения, метода молекулярной динамики.

уметь:

- запускать расчет многопоточковой задачи на суперкомпьютере;
- моделировать результат ударно-волнового воздействия на вещество по заданным начальным параметрам с использованием базы данных ударно-волновых экспериментов ОИВТ РАН;
- выполнять расчет холодной кривой заданного химического элемента на основе модели смеси идеальных газов электронов и ионов, модели Томаса-Ферми и с помощью кода VASP, реализующего метод функционала плотности;
- выполнять расчет точки на ударной адиабате с помощью кода, реализующего метод функционала плотности;
- выполнять оценку положения кривой плавления с использованием критерия Линдемана, используя результаты расчетов фоновых свойств кристалла или молекулярно-динамического моделирования.

владеть:

- навыком подготовки входных файлов для вычислительного комплекса VASP, реализующего метод функционала плотности;
- навыком обработки и визуализации выходных данных VASP, также любых табличных текстовых данных посредством модулей Python;
- навыком визуализации результатов молекулярно-динамического моделирования в программе VMD;
- навыком работы с базой данных ударно-волновых экспериментов.

#### 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	Что такое конденсированное состояние		2		5
2	Гамильтониан системы ионов и электронов		2		6
3	Метод самосогласованного поля		4		6
4	Модель Томаса-Ферми		2		6
5	Ударно-волновые эксперименты		2		6
6	Квантово-механическая модель атома		2		5
7	Теоретическое введение в метод функционала плотности		4		5
8	Метод функционала плотности для кристаллов		4		5
9	Учет ионной подсистемы		2		5

10	Учет движения ионов с помощью молекулярной динамики		2		5
11	Моделирование жидкого состояния и плазмы		4		6
Итого часов			30		60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

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

##### Семестр: 1 (Осенний)

##### 1. Что такое конденсированное состояние

Что такое конденсированное состояние. Параметры неидеальности и вырождения. Сложности теоретического учета неидеальности и вырождения. Общие сведения о моделировании термодинамических свойств конденсированного состояния. Обзор современных теоретических методов и вычислительных подходов для решения научных задач моделирования свойств конденсированного состояния. Возможности программных комплексов и вычислительных средств (суперкомпьютеров) по моделированию конденсированного вещества.

##### 2. Гамильтониан системы ионов и электронов

Гамильтониан системы ионов и электронов. Гамильтониан однородного электронного газа. Одноэлектронное приближение. Принцип Паули. Энергия основного состояния свободного электронного газа. Понятие поверхности Ферми, энергии Ферми и химического потенциала. Плотность состояний свободного электронного газа. Компьютерная демонстрация перехода распределения Ферми-Дирака в классическое распределение Больцмана в случае разреженного ферми-газа или больших температурах.

##### 3. Метод самосогласованного поля

Метод самосогласованного поля. Приближение Хартри. Вариационный принцип. Метод Хартри-Фока. Определитель Слэтера. Обменное взаимодействие. Компьютерный практикум по моделированию изотермы 300 К алюминия как смеси вырожденного ферми-газа электронов и идеального больцмановского газа ионов.

##### 4. Модель Томаса-Ферми

Модель Томаса-Ферми. Квантовые и обменные поправки к модели Томаса-Ферми. Область применимости модели по отношению к различным поправкам. Компьютерный практикум по моделированию холодной кривой и изотермы 300 К по модели Томаса-Ферми.

##### 5. Ударно-волновые эксперименты

Ударно-волновые эксперименты. Ударная адиабата. Метод торможения и отражения. База данных ударно-волновых экспериментов. Практика поиска научной информации по свойствам материалов. Моделирование ударно-волновых экспериментов.

##### 6. Квантово-механическая модель атома

Квантово-механическая модель атома. Квантовые числа, волновые функции. Учет релятивистских эффектов. Компьютерный практикум по расчету волновых функций атомов с помощью программы atomic.

## 7. Теоретическое введение в метод функционала плотности

Теоретическое введение в метод функционала плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона. Формулировки Леви-Либа. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционный функционал. Демонстрация реализации самосогласованного цикла для решения задачи поиска распределения электронной плотности в расчетной ячейке.

## 8. Метод функционала плотности для кристаллов

Метод функционала плотности для кристаллов. Программы для расчетов методом функционала плотности VASP и Quantum Espresso. Типы кристаллических решеток и формы их представления. Практика подготовки входных файлов для VASP. Термодинамические свойства электронов. Компьютерный практикум по расчету холодной кривой и изохор алюминия методом функционала плотности. Расчет электронной теплоемкости.

## 9. Учет ионной подсистемы

Учет ионной подсистемы. Квазигармоническое приближение, модель Дебая. Расчеты термодинамических свойств в квазигармоническом приближении. Фононный спектр. Оценка кривых плавления из критерия Линдемана. Компьютерный практикум по моделированию фононных свойств кристалла с использованием программного модуля PHONOPY для VASP.

## 10. Учет движения ионов с помощью молекулярной динамики

Учет движения ионов с помощью молекулярной динамики. Метод квантовой молекулярной динамики. Успехи в первопринципном моделировании свойств неупорядоченных систем и уравнений состояния материалов. Использование метода квантовой молекулярной динамики для оценки критических точек металлов. Компьютерный практикум по расчету изотермы 300 К алюминия методом квантовой молекулярной динамики.

## 11. Моделирование жидкого состояния и плазмы

Моделирование жидкого состояния и плазмы. Теоретические и практические аспекты. Объекты моделирования.

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

учебная аудитория, компьютеры и мультимедийное оборудование (проектор), доступ к сети Интернет.

## 6. Перечень рекомендуемой литературы

### Основная литература

Литература выдается на кафедре:

1. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. 685 с.
2. А. Г. Куликовский, Н. В. Погорелов, А. Ю. Семёнов. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012, 656 с.
3. M. L. Wilkins Computer Simulation of Dynamic Phenomena. Springer, 1999, 243 с.

### Дополнительная литература

Литература выдается на кафедре:

1. А. В. Бушман, Г. И. Канель, А. Л. Ли, В. Е. Фортов. Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий. Черноголовка, 1988, 200 с.
2. J. R. Asay, M. Shahinpoor. High-pressure Shock Compression of Solids. Springer, 1992, 393 с.
3. E. F. Toro. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. Springer, 1999, 619 с.

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

1. Курс лекций «Физика плазмы», <http://www.inp.nsk.su/chairs/plasma/sk/fpl.ru.shtml>

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

1. Текстовый редактор (например, Notepad++, VScode, Sublime Text).
2. Интерпретатор языка Python версии 3.x с библиотеками numpy, scipy и matplotlib.
3. Программный комплекс VASP. Программный комплекс Quantum Espresso.

#### **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 дисциплины, 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)**

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и 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	
<b>Разработчик:</b>	Д.В. Минаков, канд. физ.-мат. наук

## 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 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)

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Компьютерный практикум по термодинамике конденсированного состояния» обучающийся должен:

### знать:

- области существования неидеальной классической и вырожденной плазмы, области применимости предельных приближений;
- методы экспериментальных измерений ударных адиабат;
- основные положения приближения Хартри и Хартри-Фока, общий вид детерминанта Слэтера;
- формулировки теорем Хоэнберга-Кона и Леви-Либя;
- уравнение Кона-Шэма, смысл обменно-корреляционного функционала;
- ограничения псевдопотенциального приближения в рамках метода функционала плотности;
- способы учета вклада ионной подсистемы в расчетах свойств кристаллической и неупорядоченной фазы веществ, основы модели Дебая, квазигармонического приближения, метода молекулярной динамики.

### уметь:

- запускать расчет многопоточной задачи на суперкомпьютере;
- моделировать результат ударно-волнового воздействия на вещество по заданным начальным параметрам с использованием базы данных ударно-волновых экспериментов ОИВТ РАН;
- выполнять расчет холодной кривой заданного химического элемента на основе модели смеси идеальных газов электронов и ионов, модели Томаса-Ферми и с помощью кода VASP, реализующего метод функционала плотности;
- выполнять расчет точки на ударной адиабате с помощью кода, реализующего метод функционала плотности;
- выполнять оценку положения кривой плавления с использованием критерия Линдемана, используя результаты расчетов фоновых свойств кристалла или молекулярно-динамического моделирования.

### владеть:



- навыком подготовки входных файлов для вычислительного комплекса VASP, реализующего метод функционала плотности;
- навыком обработки и визуализации выходных данных VASP, также любых табличных текстовых данных посредством модулей Python;
- навыком визуализации результатов молекулярно-динамического моделирования в программе VMD;
- навыком работы с базой данных ударно-волновых экспериментов.

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

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия.

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

Вопросы к дифференцированному зачету:

1. Что такое конденсированное состояние
2. Гамильтониан системы ионов и электронов
3. Метод самосогласованного поля
4. Модель Томаса-Ферми
5. Ударно-волновые эксперименты
6. Квантово-механическая модель атома
7. Теоретическое введение в метод функционала плотности
8. Метод функционала плотности для кристаллов
9. Учет ионной подсистемы
10. Учет движения ионов с помощью молекулярной динамики
11. Моделирование жидкого состояния и плазмы

#### **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 бала - 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 бала - 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 бала - 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 бал - 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**

При проведении устного дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном дифференцированном зачете не должен превышать одного астрономического часа.