

**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:	First Principles Simulations and Modeling/Первопринципные методы расчета свойств материалов
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра физики и технологии наноструктур
курс:	2
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 3 (осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 45 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: Н.Л. Мацко, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры физики и технологии наноструктур 01.04.2024

Аннотация

В рамках курса будут представлены методы для предсказания кристаллической структуры материалов и расчета их свойств. Также будут решены модельные задачи для расчета электронной зонной структуры и плотности состояний, фононных свойств, сверхпроводящих свойства и др. для некоторых материалов. Для моделирования больших систем будут описаны методы молекулярной динамики и представлены межатомные потенциалы на основе машинного обучения. Курс нацелен на ознакомление учащихся с особенностями вычислений в многоэлектронных системах. Рассматривается методология расчетов, ограничения различных подходов, вводятся понятие об элементарных возбуждениях в системе, корреляционной энергии. Изучается вопрос оптических возбуждений в системе многих электронов. Будут изучены следующие темы: Теория среднего поля. Метод Хартри-Фока и первые поправки к нему. Теория функционала электронной плотности, обменно-корреляционный потенциал. Ограничения теорий среднего поля. Спектры оптического поглощения, плазмоны, экситоны, особенности электронных спектров. Корреляционная энергия. Свойства электронного газа. Модель RPA. Функция Грина. Диаграммная техника в применении к твердому телу.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- формирование представления об особенностях вычислений в многоэлектронных системах.

Задачи дисциплины

- знакомство с методологией расчетов, понимание ограничений и границ применимости различных подходов. Знакомство с понятием элементарных возбуждений в системе, корреляционной энергии. Представление об оптических возбуждениях в системе многих электронов.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
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-2.3 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	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов

физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
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-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- понятие корреляционной энергии, концепции элементарных возбуждений в системе многих электронов.

уметь:

- оценивать эффекты электрон-электронного взаимодействия, оценивать влияние многоэлектронных эффектов на оптические свойства системы.

владеть:

- основами методологии численных методов в системах многих электронов.

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	Теория среднего самосогласованного поля	2	2		3
2	Экранировка кулоновского взаимодействия и плазмоны в металлах	2	2		3
3	Электронно-оптические возбуждения	2	2		3
4	Many-Body Perturbation Theory	4	4		6
5	Численные пакеты для расчетов в рамках метода среднего самосогласованного поля и за его пределами	8	8		12
6	Функция Грина	2	2		3

7	Типовые диаграммы в твердом теле. Метод GW	2	2		3
8	Отклик системы	2	2		3
9	Метод DFT+U	6	6		9
Итого часов		30	30		45
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

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

Семестр: 3 (Осенний)

1. Теория среднего самосогласованного поля

Введение. Постановка задачи. Теория среднего самосогласованного поля. Уравнения Хартри и Хартри-Фока. Теория функционала электронной плотности. Основные ограничения указанных подходов.

2. Экранировка кулоновского взаимодействия и плазмоны в металлах

Приближение Хартри-Фока как первый порядок теории возмущений. Экранировка кулоновского взаимодействия в электронном газе. Дальнодействие кулоновского взаимодействия. Длинноволновые возмущения плотности, плазмоны и приближение RPA.

3. Электронно-оптические возбуждения

Спаривание э-м волны с поверхностными плазмонами. Квазичастица поверхностный плазмон-поляритон. Поверхностные плазмоны на структурированной поверхности.

4. Many-Body Perturbation Theory

Функция Грина и азы диаграммной техники. Диаграммное разложение функции Грина.

5. Численные пакеты для расчетов в рамках метода среднего самосогласованного поля и за его пределами

Quanyum Espresso, VASP, BerkeleyGW, Octopus.

6. Функция Грина

Свободная функция Грина. Полная функция Грина. Ур-е Дайсона. Собственно-энергетическая часть. Вершинная часть. Спектральное представление функции Грина. Квазичастичное описание электронной системы.

7. Типовые диаграммы в твердом теле. Метод GW

Уравнения Хедина. Метод GW. Приближение плазменного полюса.

8. Отклик системы

Определение. Причинность. Соотношения Крамерса-Кронига. Функция отклика системы.

9. Метод DFT+U

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

Комплект электронных презентаций/слайдов; аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук); при необходимости специальные технические средства для обучающихся инвалидов и лиц с ОВЗ.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел [Текст]/Р. Д. Маттук, -М., Мир, 1969
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.

Дополнительная литература

1. Элементарные возбуждения в твердых телах [Текст]/Д. Пайнс , пер. с англ. Ю. В. Гуляева , -М., Мир, 1965

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

Не используются

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

Демонстрация презентаций, видеоконференции.

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 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 физики и технологии наноструктур
курс:	2
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 3 (осенний) - Экзамен	
Разработчик:	Н.Л. Мацко, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
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-2.3 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
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-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «First Principles Simulations and Modeling/Первопринципные методы расчета свойств материалов» обучающийся должен:

знать:

- понятие корреляционной энергии, концепции элементарных возбуждений в системе многих электронов.

уметь:

- оценивать эффекты электрон-электронного взаимодействия, оценивать влияние многоэлектронных эффектов на оптические свойства системы.

владеть:

- основами методологии численных методов в системах многих электронов.

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 по теме прошлого занятия.

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

1. Сформулировать основные положения метода самосогласованного поля
2. Элементарные возбуждения в электронном газе. Плазмоны и оптические возбуждения.
3. Поверхностные плазмоны в металле и оптические свойства
4. Корреляционная энергия
5. Экранировка кулоновского взаимодействия
6. Фриделевские осцилляции
7. Записать уравнение Хартри-Фока и рассказать о его основных свойствах
8. Сформулировать основные положения теории функционала электронной плотности
9. Основные свойства диэлектрической функции отклика в электронном газе
10. Найти плазменную частоту в электронном газе
11. Написать диаграммы для операторов Фока, обменного взаимодействия, диаграммы экранировки в модели хаотических фаз
12. Нахождение оптических спектров с помощью спектрального представления функции Грина

Примеры экзаменационных билетов:

Билет 1.

1. Теория среднего самосогласованного поля.
2. Уравнение Хартри-Фока. Теория функционала электронной плотности.

Билет 2.

1. Экранировка и плазмоны.
2. Электронно-оптические возбуждения.

Билет 3.

1. Many-Body Perturbation Theory и Функция Грина.
2. Свободная функция Грина. Полная функция Грина. Экранированное кулоновское взаимодействие.

Билет 4.

1. Функция Грина. Практические аспекты. Типичные диаграммные блоки. Диаграммы операторов Хартри и Фока, RPA.
2. Оптические спектры и спектральное представление функции Грина

Билет 5.

1. Приближения GW и DFT+U
2. Уравнение Хартри-Фока. Теория функционала электронной плотности.

Билет 6.

1. Понятие функции отклика системы. Принцип причинности и соотношения Крамерса-Кронига.
2. Диэлектрическая функция и обратная диэлектрическая функция.

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 устной форме по билетам. В каждом билете представлено два теоретических вопроса. При проведении экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.