



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

**«Дальневосточный федеральный университет»
(ДФУ)**

ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ (ШКОЛА)

СОГЛАСОВАНО

УТВЕРЖДАЮ

Руководитель ОП

Директор департамента ДТФИТ ИНТиПМ

____ д.п.н., проф. Т.Н. Гнитецкая
(подпись) (ФИО)



____ д.ф.-м.н., проф. К. В. Нефедев
(подпись) (И.О. Фамилия)

Научный руководитель ОП

«20» сентября 2023 г.

____ д.ф.-м.н., проф. Л. Л. Афремов
(подпись) (ФИО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Ab-initio вычисления, квантово-механические и квантово-химические расчёты из первых принципов

Специальность 03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика
Специализация Фундаментальная физика и информатика

(Совместно с ИАПУ ДВО РАН, ТОИ ДВО РАН)

Форма подготовки: очная

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки 03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика, утвержденного приказом Минобрнауки России от от 1 марта 2018 г. N 158 (с изменениями и дополнениями) Рабочая программа обсуждена на заседании департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий, протокол № 1 от «20» сентября 2023 г.
Директор департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий д.ф.-м.н., проф. К.В. Нефедев
Составитель: доцент, к.ф.-м.н. И.Г. Ильюшин.

Владивосток
2023

Оборотная сторона титульного листа РПД

I. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

II. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

III. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

IV. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Ab-initio вычисления, квантово-механические и квантово-химические расчёты из первых принципов

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачётных единицы и 180 академических часов. Является дисциплиной части, формируемой участниками образовательных отношений, профессионального блока дисциплин, модуль фундаментальной физики, изучается в 10 семестре и завершается экзаменом. Учебным планом предусмотрено проведение лекционных занятий в объеме 34 часов, лабораторных – 36, практических – 32 часов, а также выделен 51 час на самостоятельную работу студента и 27 часов на контроль.

Язык реализации: русский.

Цель: изучение методов вычисления характеристик физических систем методами квантово-механических и квантово-химических принципов, базирующихся на численном решении квантовых уравнений.

Задачи:

1. Формирование знаний о решении задач квантовой механики в конденсированных средах.
2. Формирование знаний принципов применения методов квантово-химических и квантово-механических расчетов магнитных и электрических свойств твердых тел.
3. Формирование умения квалифицированного проведения исследований материалов с помощью вычислений из «первых принципов».

Дисциплина «*Ab-initio* вычисления, квантово-механические и квантово-химические расчеты из первых принципов» логически связана с содержанием следующих дисциплин: «Дифференциальные и интегральные уравнения, вариационное исчисление», «Вероятность в статистической механике и квантовой статистике», «Квантовая механика», «Физика конденсированного состояния», «Кристаллография и кристаллофизика» и других.

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы, характеризуют формирование следующих компетенций, индикаторов достижения компетенций:

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции (результат освоения)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
	ПК-10 Способен осуществлять подготовку данных и выполнение тестовых процедур ПО	ПК-10.1 Осуществляет мониторинг работ по тестированию ПО и информирование о ходе работ заинтересованных лиц	Знает жизненный цикл ПО, различные методологии его разработки и место тестирования в данном процессе Умеет анализировать ответы, выявлять пропущенную информацию Владеет оформлением выводов по результатам анализа требований заказчика к ПО для исключения некорректно сформулированных требований
	ПК-12 Способен управлять этапами жизненного цикла методологической и технологической инфраструктуры анализа больших данных в организации	ПК-12.1 Управляет получением, хранением, передачей, обработкой больших данных	Знает основы информационных систем и технологий Умеет разрабатывать системы хранения и обработки данных Владеет созданием параллельных систем хранения и обработки информации

I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ:

Цель: изучение методов вычисления характеристик физических систем методами квантово-механических и квантово-химических принципов, базирующихся на численном решении квантовых уравнений.

Задачи:

1. Формирование знаний о решении задач квантовой механики в конденсированных средах.
2. Формирование знаний принципов применения методов квантово-химических и квантово-механических расчетов магнитных и электрических свойств твердых тел.
3. Формирование умения квалифицированного проведения исследований материалов с помощью вычислений из «первых принципов».

Дисциплина «Ab-initio вычисления, квантово-механические и квантово-химические расчеты из первых принципов» логически связана с содержанием следующих дисциплин: «Дифференциальные и интегральные уравнения, вариационное исчисление», «Вероятность в статистической механике и квантовой статистике», «Квантовая механика», «Физика конденсированного состояния», «Кристаллография и кристаллофизика» и других.

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы, характеризуют формирование следующих компетенций, индикаторов достижения компетенций:

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции (результат освоения)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
	ПК-10 Способен осуществлять подготовку тестовых данных и выполнение тестовых процедур ПО	ПК-10.1 Осуществляет мониторинг работ по тестированию ПО и информирование о ходе работ заинтересованных лиц	Знает жизненный цикл ПО, различные методологии его разработки и место тестирования в данном процессе Умеет анализировать ответы, выявлять пропущенную информацию Владеет оформлением выводов по результатам анализа требований заказчика к ПО для исключения

			некорректно сформулированных требований
	ПК-12 Способен управлять этапами жизненного цикла методологической и технологической инфраструктуры анализа больших данных в организации	ПК-12.1 Управляет получением, хранением, передачей, обработкой больших данных	Знает основы информационных систем и технологий Умеет разрабатывать системы хранения и обработки данных Владеет созданием параллельных систем хранения и обработки информации

II. ТРУДОЁМКОСТЬ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачётных единицы и 180 академических часов. Является дисциплиной части, формируемой участниками образовательных отношений, профессионального блока дисциплин, модуль фундаментальной физики, изучается в 10 семестре и завершается экзаменом. Учебным планом предусмотрено проведение лекционных занятий в объеме 34 часов, лабораторных – 36, практических – 32 часов, а также выделен 51 час на самостоятельную работу студента и 27 часов на контроль.

III. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Форма обучения – очная

№	Наименование раздела дисциплины	С е м е с т р	Количество часов по видам учебных занятий и работы обучающегося						Формы промежуточной аттестации
			Лек	Лаб	Пр	ОК *	СР	Конт роль	
1	Раздел №1 Квантовые модели описания твердого тела	10	17	18	16		25	13	
2	Раздел № 2 Основные уравнения в физике твердого тела	10	17	18	16		26	14	
	Итого:		34	36	32		51	*27*	Экзамен

IV. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Раздел 1. Квантовые модели описания твердого тела. Дискретная упругая цепочка. Квантовая теория непрерывной упругой струны. Плазмоны. Длинноволновые оптические фононы в изотропном кристалле. Акустические колебания с большой длиной волны. Ферромагнитные магноны. Антиферромагнитные магноны. Другие вопросы, связанные с ферромагнитными магнонами.

Тема 1. Акустические фононы . Дискретная упругая цепочка. Квантовая теория непрерывной упругой струны. Акустические колебания с большой длиной волны. Фононы в изотропном кристалле. Фононы в конденсированном бозонном газе.

Тема 2. Плазмоны, оптические фононы и поляризационные волны. Плазмоны. Длинноволновые оптические фононы в изотропном кристалле. Взаимодействие оптических фононов с фотонами.

Тема 3. Магноны Ферромагнитные магноны. Антиферромагнитные магноны. Другие вопросы, связанные с ферромагнитными магнонами.

Раздел 2. Основные квантовые уравнения в физике твердого тела.

Метод уравнений движения для полей частиц. Уравнение Хартри – Фока. Электронный газ в приближениях Хартри и Хартри - Фока. Метод самосогласованного поля. Диэлектрический формализм. Диэлектрическое экранирование точечных заряженных примесей. Численные расчеты энергии корреляции. Электрон-электронное взаимодействие.

Диэлектрический формализм на языке диаграммной техники. Свободный электрон в магнитном поле. Эффект де Гааза — Ван Альфена.

Полуклассическое рассмотрение динамики электрона в магнитном поле.

Топологические свойства орбит в магнитном поле. Циклотронный резонанс на сфероидальных энергетических поверхностях.

Магнетосопротивление. Уравнение переноса для магнетосопротивления.

Метод Вигнера — Зейтц . Приближение почти свободных электронов (обобщенный метод ортогонализированных плоских волн).

Энергетические зоны, циклотронный резонанс и примесные состояния.

Энергетические зоны. Примесные состояния и уровни Ландау в полупроводниках. Экситоны

Тема 4. Фермионные поля и приближение Хартри-Фока. Метод уравнений движения для полей частиц. Уравнение Хартри – Фока. Электронный газ в приближениях Хартри и Хартри - Фока.

Тема 5. Теория систем многих частиц и её применение к электронному газу. Метод самосогласованного поля. Диэлектрический формализм. Диэлектрическое экранирование точечных заряженных примесей. Численные расчеты энергии корреляции. Электрон-электронное

взаимодействие. Диэлектрический формализм на языке диаграммной техники. Теорема Блоха. Зоны Бриллюэна и симметрия кристалла.

Тема 6. Функции Блоха. Теорема Блоха. Зоны Бриллюэна и симметрия кристалла

Тема 7. Динамика электронов в магнитном поле Свободный электрон в магнитном поле. Эффект де Гааза — Ван Альфена. Полуклассическое рассмотрение динамики электрона в магнитном поле. Топологические свойства орбит в магнитном поле. Циклотронный резонанс на сфероидальных энергетических поверхностях. Магнетосопротивление. Уравнение переноса для магнетосопротивления.

Тема 8. Расчет энергетических зон и поверхностей Ферми. Метод Вигнера — Зейтца. Приближение почти свободных электронов (обобщенный метод ортогонализированных плоских волн).

Тема 9. Полупроводниковые кристаллы. Энергетические зоны, циклотронный резонанс и примесные состояния. Энергетические зоны. Примесные состояния и уровни Ландау в полупроводниках. Экситоны.

V. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Лабораторная работа 1. Акустические фононы. Рассматриваются типы химической связи и атомной структуры кристаллических твёрдых тел и, в частности, важнейших полупроводников.

Лабораторная работа 2. Плазмоны, оптические фононы и поляризационные волны. Рассматриваются уравнения движения атомов в кристалле и их решения, закон дисперсии упругих волн, акустические и оптические колебания, квантование колебаний, понятие квазичастицы на примере фонона.

Лабораторная работа 3. Магноны. Рассматриваются квантование одномерной цепочки. Роль нелинейности (кубический и 4-го порядка члены в гамильтониане). Определяется теплоемкость одно- дву- и трехмерной решеток, вклад в теплоемкость от оптических фононов.

Лабораторная работа 4. Фермионные поля. Задача экранирования (уравнение Пуассона). Экранирование невырожденным электронным газом. Экранирование 2D электронами. Квантовые эффекты в задаче экранирования (фриделевские осцилляции). Плазмоны в трехмерном металле

Лабораторная работа 5. Теория систем многих частиц. Электрон-фононное взаимодействие в модели Кронига-Пенни. Электрон-фононное

взаимодействие в приближении туннельного гамильтониана. Электрон-фононное взаимодействие. Пьезоэффект

Лабораторная работа 6. Функции Блоха. Проводимость металла в модели Друде. Вклад в проводимость от рассеяния на примеси: шар радиуса R – классическая и квантовая задачи. Электрон-фононное рассеяние. Температурная зависимость. 1D и 2D модели

Лабораторная работа 7. Динамика Электронов в магнитном поле. Кинетическое уравнение Больцмана

Найти проводимость электронного газа в приближении времени релаксации. Показать, что если электронный газ невырожден, а тепловая скорость электронов больше скорости звука, то рассеяние электронов на акустических фонах является квазиупругим. Решить линеаризованное уравнение Больцмана для электронов в неоднородном электрическом поле.

Лабораторная работа 8. Расчет энергетических зон и поверхностей Ферми. Найти компоненты тензора электрической проводимости в слабом магнитном поле в приближении времени релаксации Решить задачу 1 в переменном магнитном поле Обсудить задачу 1 в случае 2D электронов в сильном магнитном поле (квантовый эффект Холла).

Показать, что в пределе низких температур в однозонном приближении магнетосопротивление равно нулю.

Лабораторная работа 9. Полупроводниковые кристаллы. Найти электронную теплоемкость двумерного газа. Найти уровни энергии электронов в квантовой проволоке с прямоугольным спектром в присутствии заряженной примеси. Записать гамильтониан Рашбы (спин-орбитальное взаимодействие на изотропной ориентированной поверхности) и найти спектр электронов. Рассматриваются атомная структура и особенности энергетического спектра неупорядоченных (аморфных) полупроводников, плотность состояний и локализация электронных состояний, роль ближнего порядка в формировании электронного спектра некристаллических полупроводников, спектры оптического поглощения.

VI. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Код и наименование индикатора достижения	Результаты обучения	Оценочные средства *	
				текущий контроль	Промежуточная аттестация

1	Раздел №1 Квантовые модели описания твердого тела	ПК-10.1 Осуществляет мониторинг работ по тестированию ПО и информирование о ходе работ заинтересованных лиц	Знает жизненный цикл ПО, различные методологии его разработки и место тестирования в данном процессе Умеет анализировать ответы, выявлять пропущенную информацию Владеет оформлением выводов по результатам анализа требований заказчика к ПО для исключения некорректно сформулированных требований	УО-1 ПР-1	
2	Раздел № 2 Основные квантовые уравнения в физике твердого тела	ПК-12.1 Управляет получением, хранением, передачей, обработкой больших данных	Знает основы информационных систем и технологий Умеет разрабатывать системы хранения и обработки данных Владеет созданием параллельных систем	УО-1 ПР-1	

			хранения и обработки информации		
	Экзамен				УО-1

VII. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Самостоятельная работа определяется как индивидуальная или коллективная учебная деятельность, осуществляемая без непосредственного руководства педагога, но по его заданиям и под его контролем. Самостоятельная работа – это познавательная учебная деятельность, когда последовательность мышления студента, его умственных и практических операций и действий зависит и определяется самим студентом.

Самостоятельная работа студентов способствует развитию самостоятельности, ответственности и организованности, творческого подхода к решению проблем учебного и профессионального уровня, что в итоге приводит к развитию навыка самостоятельного планирования и реализации деятельности.

Целью самостоятельной работы студентов является овладение необходимыми компетенциями по своему направлению подготовки, опытом творческой и исследовательской деятельности.

Формы самостоятельной работы студентов:

- работа с основной и дополнительной литературой, Интернет ресурсами;
- самостоятельное ознакомление с лекционным материалом, представленным на электронных носителях, в библиотеке образовательного учреждения;
- подготовка реферативных обзоров источников периодической печати, опорных конспектов, заранее определенных преподавателем;
- поиск информации по теме, с последующим ее представлением в аудитории в форме доклада, презентаций;

- подготовка к выполнению аудиторных контрольных работ;
- выполнение домашних контрольных работ;
- выполнение тестовых заданий, решение задач;
- составление кроссвордов, схем;
- подготовка сообщений к выступлению на семинаре, конференции;
- заполнение рабочей тетради;
- написание эссе, курсовой работы;
- подготовка к деловым и ролевым играм;
- составление резюме;
- подготовка к зачетам и экзаменам;
- другие виды деятельности, организуемые и осуществляемые образовательным учреждением и органами студенческого самоуправления.

VIII. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

(печатные и электронные издания)

1. Барановский, Виктор Иванович. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. - Изд. 2-е, испр. и доп. - Санкт-Петербург : Лань, 2017. - 426 с
<https://library.dvfu.ru/lib/document/EK/1DB24AE4-C9C0-4C4C-B0C7-C4A1F492319C/>
2. Беданоков, Р. А. Квантовая физика и элементы квантовой механики : учебник для вузов / Р. А. Беданоков. - 3-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2023. - 116 с.
<https://library.dvfu.ru/lib/document/EBSLan/B09B6FAE-DA8D-4CD5-BD22-7AF3B36F89CC/>
3. Кручинин, Н. Ю. Метод функционала плотности. Ab initio молекулярная динамика : методические указания к лабораторным работам / Н. Ю. Кручинин. — Оренбург : Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2014. — 67 с. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=IPRbooks:IPRbooks-51558&theme=FEFU>

Дополнительная литература

(печатные и электронные издания)

1. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург : Лань, 2010. — 384 с. — ISBN 978-5-8114-1032-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=Lan:Lan-156&theme=FEFU>
2. Филимонова, Н. И. Физика конденсированного состояния : учебное пособие / Н. И. Филимонова, Р. П. Дикарева. — Новосибирск : Новосибирский государственный технический университет, 2016. — 136 с. — ISBN 978-5-7782-2960-0. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=IPRbooks:IPRbooks-91569&theme=FEFU>
3. Гольдаде, В. А. Физика конденсированного состояния / В. А. Гольдаде, Л. С. Пинчук. — Минск : Белорусская наука, 2009. — 648 с. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=IPRbooks:IPRbooks-11505&theme=FEFU>

**Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети
«Интернет»**

1. <http://e.lanbook.com/>
2. <http://www.studentlibrary.ru/>
3. <http://znanium.com/>
4. <http://www.nelbook.ru/>

**Перечень информационных технологий
и программного обеспечения**

Платформа электронного обучения Blackboard ДВФУ.

IX. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Успешное освоение дисциплины предполагает активную работу студентов на всех занятиях аудиторной формы: лекциях и практиках, выполнении аттестационных мероприятий. В процессе изучения дисциплины студенту необходимо ориентироваться на проработку лекционного материала, подготовку к практическим занятиям, выполнение контрольных и творческих работ.

Освоение дисциплины предусматривает со стороны преподавателя текущий контроль за посещением студентами лекций, подготовкой и выполнением всех практических заданий, выполнением всех видов

самостоятельной работы.

Промежуточной аттестацией по дисциплине является *экзамен*.

Студент считается аттестованным по дисциплине при условии выполнения всех видов текущего контроля и самостоятельной работы, предусмотренных учебной программой.

Шкала оценивания сформированности образовательных результатов по дисциплине представлена в фонде оценочных средств (ФОС).

Х. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебные занятия по дисциплине могут проводиться в следующих помещениях, оснащенных соответствующим оборудованием и программным обеспечением, расположенных по адресу 690022, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10:

Перечень материально-технического и программного обеспечения дисциплины приведен в таблице.

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы
Учебные аудитории для проведения учебных занятий:	
690922, Приморский край, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10, этаж 4, 75,75 кв.м., № помещения 2249	Учебная аудитория для проведения лекционных и практических занятий. Компьютерный класс (L450) 20 компьютеров (системный блок модель - 30AGCT01WW P3+монитором АОС 28» L12868POU).
Помещения для самостоятельной работы:	
690922, Приморский край, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10, этаж 10, 1016,2 кв.м., № помещения 477	Аудитории для самостоятельной работы студентов. Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ДВФУ. Комплекты учебной мебели (столы и стулья). Моноблок Lenovo C360G-i34164G500UDK – 115 шт. Интегрированный сенсорный дисплей Polymedia FlipBox. Копир-принтер-цветной сканер в e-mail с 4 лотками Xerox WorkCentre 5330 (WC5330C). Полноцветный копир-принтер-сканер Xerox WorkCentre 7530 (WC7530CPS). Скорость доступа в Интернет 500 Мбит/сек. Рабочие места для людей с ограниченными возможностями здоровья оснащены дисплеями и

	принтерами Брайля (А1007 (А1042))
--	-----------------------------------

Для проведения учебных занятий по дисциплине, а также для организации самостоятельной работы студентам доступно следующее лабораторное оборудование и специализированные кабинеты, соответствующие действующим санитарным и противопожарным нормам, а также требованиям техники безопасности при проведении учебных и научно-производственных работ.

В целях обеспечения специальных условий обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в ДВФУ все здания оборудованы пандусами, лифтами, подъемниками, специализированными местами, оснащенными туалетными комнатами, табличками информационно-навигационной поддержки.