

Аннотация
к рабочей программе дисциплины
«Основы теории функционала плотности»
Направление: **03.04.02 Физика**
Направленность (профиль): Общая и фундаментальная физика

Программа курса «**Основы теории функционала плотности**» составлена в соответствии с требованиями СУОС по направлению подготовки **03.04.02 Физика, направленность «Общая и фундаментальная физика»**, а также задачами, стоящими перед Новосибирским государственным университетом по реализации Программы развития НГУ. Дисциплина относится к вариативной части программы и является одной из профессиональных дисциплин по выбору, реализуемых на физическом факультете Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ) кафедрой физических методов исследования твёрдого тела. Дисциплина изучается студентами магистратуры физического факультета.

Цели курса — познакомить студентов-физиков, специализирующихся на кафедре физических методов исследования твердого тела, с основами теории функционала плотности (DFT). Эта теория была разработана в начале 1960 годов американским физиком –теоретиком Вальтером Коном (Walter Kohn). DFT разработана на основе утверждения, что энергия многоэлектронной системы (молекул и твердых тел) является функционалом электронной плотности, в отличие от традиционного подхода на основе волновой функции (в частности, теории Хартри-Фока), в котором энергия является функционалом волновой функции. В DFT эффективно учитывается т.н. электронная корреляция, что стало основой успеха этой теории в разнообразных применениях. В 1998 г. Кohn получил Нобелевскую премию за DFT. В настоящее время DFT является основным «инструментом» в компьютерных вычислениях электронной и геометрической структуры молекул и твердых тел. Данный курс предлагает краткое объяснение основ DFT и расчетной структуры конкретных пакетов программ, а именно Gaussian (для расчета молекул) и VASP (для расчета периодических систем), наиболее широко используемых в научных исследованиях. Приводится упрощенный вывод уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма на основе вариационного принципа и метода неопределенных множителей Лагранжа. Раскрывается причина итерационного (т.н. самосогласованного) метода решений этих уравнений. Рассматривается т.н. неограниченный подход для изучения спин-поляризованных систем и молекул с открытой оболочкой (радикалов). На практических занятиях предлагается освоение указанных пакетов программ до уровня, позволяющего самостоятельно решать конкретные практические задачи.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<p>ПК-1 Способен использовать специализированные знания в области физики при решении поставленных задач в научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p>	<p>ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p> <p>ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p>	<p>Знать методы и способы постановки и решения задач в рамках теории функционала плотности, вычислительные алгоритмы DFT, используемые в пакетах GAUSSIAN и VASP, для расчета молекул и твердых тел; базовые понятия, теоремы и уравнения DFT и способы применения результатов расчетов при решении научно-инновационных задач и степень достоверности тех или рассчитанных параметров системы.</p> <p>Уметь самостоятельно ставить вычислительную задачу (в частности, задавать начальную геометрию, спиновое состояние, выбирать обменно-корреляционный функционал и пр.) и решать конкретные задачи научных исследований в области физики конденсированных состояний; использовать набор программ для подготовки и анализа расчета, например, Chemcraft (подготовка и просмотр геометрий молекулярных и периодических систем) и VESTA (визуализатор периодических систем).</p> <p>Владеть навыками работы в различных операционных системах (Windows/Linux) с различными вычислительными ресурсами (персональный компьютер/кластер); навыками работы со структурными базами данных, например, Database of Zeolite Structures, с CIF файлом (Crystallographic Information File) - стандартным текстовым файлом, содержащим кристаллографическую информацию.</p>

Курс рассчитан на один семестр. Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, самостоятельная работа студента и её контроль преподавателями с помощью заданий, дифференцированный зачёт.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: задания для самостоятельного решения на компьютере.

Промежуточная аттестация: дифференцированный зачёт.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет **72** академических часа / **2** зачетные единицы.