

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

Физический факультет
Кафедра физических методов исследования твёрдого тела



Рабочая программа дисциплины

ОСНОВЫ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

направление подготовки: **03.04.02 Физика**
направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения
Очная

| Семестр | Общий объем | Виды учебных занятий (в часах) | | | | Промежуточная аттестация (в часах) | | | | |
|--|-------------|--|----------------------|----------------------|--|---|--|-------|--------------------------|---------|
| | | Контактная работа обучающихся с преподавателем | | | Самостоятельная работа, не включая период сессии | Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации | Контактная работа обучающихся с преподавателем | | | |
| | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные занятия | | | Консультации | Зачет | Дифференцированный зачет | Экзамен |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 |
| 1 | 72 | 16 | 16 | | 38 | | | | 2 | |
| Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 34 часа | | | | | | | | | | |
| Компетенции ПК-1 | | | | | | | | | | |

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2022

Содержание

| | |
|---|---|
| 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы. | 3 |
| 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы. | 4 |
| 3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу. | 4 |
| 4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий. | 5 |
| 5. Перечень учебной литературы. | 7 |
| 6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся. | 7 |
| 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины. | 8 |
| 8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине. | 8 |
| 9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине. | 8 |
| 10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине. | 9 |

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Дисциплина «Основы теории функционала плотности» представляет собой начальный курс вычислительных методов исследования структуры вещества в рамках теории функционала для обучения студентов-физиков, специализирующихся в области физики конденсированного состояния вещества, включая разделы физики твердого тела, относящиеся к методам исследования структуры вещества.

Целью освоения курса является ознакомление студентов с основными идеями теории: 1) использование электронной плотности в качестве фундаментальной переменной вместо волновой функции; 2) использование в качестве «реперной» системы невзаимодействующих электронов с плотностью, равной истинной электронной плотности; 3) итерационным (самосогласованным) решением основных уравнений теории (уравнений Кона-Шэма). Кроме преподавания теоретических знаний, данный курс предназначен для обучения практическим навыкам расчета молекул и твердых тел с помощью современных пакетов программ Gaussian и VASP.

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, использующиеся 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</p> |

| Результаты освоения образовательной программы (компетенции) | Индикаторы | Результаты обучения по дисциплине |
|---|------------|--|
| | | (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. |

Всюду, где это допускается уровнем знаний и подготовки студентов, материал лекционного курса увязывается с современными работами в области DFT моделирования. Все практические занятия проводятся в интерактивной форме в компьютерном классе учебного центра ИК СО РАН. Специально выделяются темы, рассматриваемые в текущей профессиональной научной литературе, и планах дальнейших работ в институтах, в которых студенты планируют проходить научную практику. Материал курса увязывается с разделами физики и математики, изучаемыми студентами (физика твердого тела, высшая алгебра и т.д.) и спецкурсами, параллельно читаемых по данной специальности (рентгенография поликристаллов, ИК-спектроскопия).

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Основы теории функционала плотности» требует базовые знания магистрантов по таким разделам физики, как квантовая механика, физика твердого тела, статистическая физика и термодинамика, а также по математике (дифференциальное и интегральное исчисления, линейная алгебра и др.). Курс является одной из дисциплин профессионального цикла подготовки по направлению 03.04.02 Физика. Общая и фундаментальная физика. Он должен предшествовать выполнению квалификационной работы магистранта, т.к. дает ему необходимые знания, навыки и предоставляет инструменты для компьютерного DFT моделирования наноматериалов в рамках подготовки его квалификационной работы.

3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

| Семестр | Общий объем | Виды учебных занятий (в часах) | | | | Промежуточная аттестация (в часах) | | | |
|---------|-------------|--|----------------------|----------------------|--|---|--|-------|--------------------------|
| | | Контактная работа обучающихся с преподавателем | | | Самостоятельная работа, не включая период сессии | Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации | Контактная работа обучающихся с преподавателем | | |
| | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные занятия | | | Консультации | Зачет | Дифференцированный зачет |
| | | | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|--|----|----|----|---|----|---|---|---|----|----|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 |
| 1 | 72 | 16 | 16 | | 38 | | | | 2 | |
| Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 34 часа | | | | | | | | | | |
| Компетенции ПК-1 | | | | | | | | | | |

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, практические занятия, самостоятельная работа студента и её контроль преподавателями с помощью заданий, дифференцированный зачёт.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

- текущий контроль успеваемости: расчетные задания для самостоятельного решения на компьютере;

- промежуточная аттестация: дифференцированный зачёт.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет 2 зачетные единицы.

- занятия лекционного типа – 16 часов;
- практические занятия – 16 часов;
- самостоятельная работа обучающегося в течение семестра, не включая период сессии – 38 часов;
- дифференцированный зачёт – 2 часа.

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, практические занятия, дифференцированный зачёт) составляет 34 часа.

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часа.

| № п/п | Раздел дисциплины | Неделя семестра | Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах) | | | | | Консультации перед экзаменом (часов) | Промежуточная аттестация (в часах) |
|-------|--|-----------------|--|-----------------|----------------------|---|---|--------------------------------------|------------------------------------|
| | | | Всего | Аудиторные часы | | Сам. работа во время занятий (не включая период сессии) | Сам. работа во время промежуточной аттестации | | |
| | | | | Лекции | Практические занятия | | | | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
| 1. | Начальные понятия теории многоэлектронных систем | 1 | 8 | 2 | | 6 | | | |
| 2. | Уравнения самосогласованного поля | 2 | 12 | 2 | 4 | 6 | | | |
| 3. | Корреляция электронов | 3 | 8 | 2 | | 6 | | | |

| | | | | | | | | | |
|--------------|--|-----|-----------|-----------|-----------|-----------|--|--|----------|
| 4. | Теория функционала плотности Коэнберга-Кона-Шэма | 4-5 | 14 | 4 | 4 | 6 | | | |
| 5. | Обменно-корреляционные функционалы | 6 | 12 | 2 | 4 | 6 | | | |
| 6. | Основы расчетов твердых тел | 7 | 16 | 4 | 4 | 8 | | | |
| 7. | Дифференцированный зачёт | | 2 | | | | | | 2 |
| Всего | | | 72 | 16 | 16 | 38 | | | 2 |

Программа и основное содержание лекций (16 часов)

1. Начальные понятия теории многоэлектронных систем (2 часа).

Волновая функция многоэлектронной системы. Симметрия физических систем и типы волновых функций. Понятие пространственной и спин-орбитали. Одно- и многодетерминантные функции. Полная энергия. Структура поверхности потенциальной энергии.

2. Уравнения самосогласованного поля (4 часа).

Энергия однодетерминантного состояния. Закрытые и открытые оболочки. Варьирование полной энергии – функционала волновой функции. Метод неопределенных множителей Лагранжа. Уравнения Хартри-Фока. Разложение орбиталей по базисным функциям. Типы базисов. Уравнения Рутана. Анализ заселенностей. Блок-схема решений уравнений самосогласованного поля в квантово-химических пакетах.

3. Корреляция электронов (2 часа).

Пост-хартрифовские приближения. Матрица электронной плотности 1-го и 2-го порядка (корреляционная функция). Функция корреляционной дырки. Энергия как функционал матриц плотности.

4. Теория функционала плотности Коэнберга-Кона-Шэма (4 часа).

Электронная плотность как фундаментальная переменная. Первая и вторая теорема Коэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма.

5. Обменно-корреляционные функционалы (2 часа).

Приближение локальной плотности. Градиентное разложение. Обобщенное градиентное разложение (GGA). Мета-GGA. Гибридные функционалы. Орбитально-зависимые функционалы. DFT+U

6. Основы расчетов твердых тел (2 часа).

Теорема Блоха. Зоны Бриллюэна. Симметричные точки. Плотность состояний. Базис плоских волн. Псевдопотенциалы. Метод присоединенных плоских волн. Структура популяционных пакетов для периодических DFT расчетов (VASP, ESPRESSO).

Программа практических занятий (16 часов)

Занятие 1. Расчеты атомов и простых молекул (4 часа).

Для освоения WebMO интерфейса и логики квантово-химических расчетов в молекулярном и периодическом вариантах предлагается проделать PBE/DFT расчеты в пакете Gaussian и VASP(ESPRESSO). Для периодических расчетов в качестве образца используется набор примеров на сайте https://www.vasp.at/wiki/index.php/Atoms_and_Molecules_-_Tutorial

Рассматривается система по выбору. Варианты расчета: 1) в одной точке (при заданной геометрии), 2) расчет с релаксацией геометрии, 3) расчет частот колебаний, 4) расчет в спинполяризованном варианте. Подготовка и просмотр решений должна быть параллельно с WebMO проделана в Chemcraft'е.

Занятие 2. Расчеты 3D структур (4 часа). Прodelать PBE/DFT расчеты в пакете VASP(ESPRESSO) для объемной структуры металла (оксида) с гранецентрированной решеткой (например, Si). Геометрию взять из баз данных (ICSD, Zeolite database) в виде CIF файла. Примеры входных файлов – на сайте https://www.vasp.at/wiki/index.php/Bulk_Systems_-_Tutorial

Выполнить расчет с фиксированной геометрией, затем с релаксацией геометрии. Визуализировать результаты в программе VESTA.

Занятие 3. Расчеты поверхностей (4 часа). Выполнить расчет поверхностей металла в программе VASP в модели слэба при фиксированной геометрии и с релаксацией поверхности. Примеры входных файлов – на сайте https://www.vasp.at/wiki/index.php/Surface_Science_-_Tutorial

Занятие 4. Индивидуальные задачи по выбору (4 часа). Выполнить расчеты молекулярных систем (Gaussian) или периодических систем (VASP или ESPRESSO) по выбору. Желательно связать расчеты с темой работы в лаборатории.

Самостоятельная работа студентов (38 часов)

| Перечень занятий на СРС | Объем, час |
|--|------------|
| Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях | 9 |
| Подготовка к практическим занятиям. | 9 |
| Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях | 9 |
| Подготовка к практическим занятиям. | 9 |
| Подготовка к дифференцированному зачёту | 2 |

5. Перечень учебной литературы.

1. Мак-Вини Р., Сатклиф Б. Квантовая механика молекул. - М.: Мир, 1972.(8 экз.)
2. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. – М.: Бином, 2010., ISBN 978-5-9963-0080-8 (25 экз.)

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

3. Peter Kratzer and Jörg Neugebauer, The Basics of Electronic Structure. Theory for Periodic Systems. Frontiers in Chemistry, 2019, vol. 7, Article 106.
4. Szabo A., Ostlund N.S. Modern quantum chemistry. - Dover, Mineola, New York, 1996
5. Parr R., Yang W. Density-functional theory of atoms and molecules. – Oxford Univ. Press, New York, 1989

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- https://www.vasp.at/wiki/index.php/Lectures_and_presentations
- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

7.1 Современные профессиональные базы данных

Не используются.

7.2. Информационные справочные системы

<https://webbook.nist.gov/chemistry/>

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

веб-интерфейс WebMO на базе вычислительного кластера ИК СО РАН.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно

«Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется в ходе практических занятий путём проверки расчетных заданий для самостоятельного решения на компьютере.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области DFT моделирования в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на дифференцированном зачёте. Он проводится в конце семестра в устной форме в виде собеседования по результатам практической работы, оформленной по типу курсовой работы. Устные вопросы подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенции ПК-1.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

| Индикатор | Результат обучения по дисциплине | Оценочные средства |
|--|---|---|
| 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. | 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. | Проведение практических работ, дифференцированный зачет |

| | | |
|---|---|--|
| <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>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). 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> | <p>Проведение практических работ, дифференцированный зачет</p> |
|---|---|--|

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Основы теории функционала плотности».

Таблица 10.2

| Критерии оценивания результатов обучения | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Уровень освоения компетенции | | | |
|--|---|--|---|--|---|
| | | Не сформирован (0 баллов) | Пороговый уровень (3 балла) | Базовый уровень (4 балла) | Продвинутый уровень (5 баллов) |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| Полнота знаний | ПК 1.1 | Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки. | Демонстрирует общие знания базовых понятий по темам/разделам дисциплины. Допускается значительное количество негрубых ошибок. | Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы. | Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы. |
| Наличие умений | ПК 1.2 | Отсутствие минимальных умений. | Продемонстрированы частично основные умения. Решены | Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми | Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания |

| | | | | | |
|-----------------------------------|--------|--|--|--|---|
| | | Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки. | типовые задачи. Допущены негрубые ошибки. | ошибками или с недочетами. | в полном объеме без недочетов и ошибок. |
| Наличие навыков (владение опытом) | ПК 1.2 | Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок. | Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами. | Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами. | Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач. |

10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примеры заданий для самостоятельного решения

1. Определить в расчетах потенциал ионизации молекулы (выбранной студентом) по теореме Купманса и методом дельта-ССП.
2. Определить в расчетах степень подмешивания спиновых контаминантов в неограниченном решении для выбранной молекулы-радикала или комплекса переходного металла.
3. Определить энергию активации процесса «выворачивания» молекулы NH_3
4. В периодическом расчете определить геометрическую и электронную структуру нити C_n
5. В периодическом расчете определить структуру графена

Примерные вопросы на дифференцированный зачет

1. Качественно объяснить, почему уравнения Хартри-Фока или Кона-Шэма решаются только итерационным способом.
2. Оценить в расчетах величину энергии межэлектронного отталкивания произвольной системы (на выбор).

-
1. Чему равна вероятность найти электрон атома водорода точно на ядре
 2. Показать аналитически в приближении Хартри-Фока, что электроны с параллельными спинами избегают друг друга.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «Основы теории функционала плотности»
по направлению подготовки 03.04.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

| № | Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа) | Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ | Подпись ответственного |
|---|--|--|------------------------|
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |