

**ГОУ ВПО Российско-Армянский (Славянский)
университет**

Директор Института

Утверждено

А.К. Агаронян



«30» апреля 2025г., протокол № 05

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины: Б1.О.19 Теория функционала плотности и методы моделирования квантовых систем

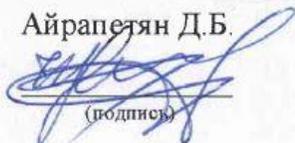
Автор (ы) к.ф.-м.н., преподаватель Гумарова Ирина Ивановна
Ф.И.О, ученое звание (при наличии), ученая степень (при наличии)

Направление подготовки: 11.03.04 Электроника и наноэлектроника
Наименование образовательной программы: Квантовая информатика

Согласовано:

Заведующий Кафедрой общей физики и квантовых наноструктур

Айрапетян Д.Б.

A handwritten signature in blue ink, appearing to be 'D.B. Ayrapetian', written over a horizontal line.

(подпись)

1. АННОТАЦИЯ

1.1. Краткое описание содержания данной дисциплины;

Теория функционала плотности одна из самых распространённых для решения уравнения Шредингера для квантовых систем, таких как молекулы, кристаллы, поверхности, двумерных и низкоразмерных материалах. Данный метод может применяться для расчета физических, химических параметров системы, и предсказания новых стабильных материалов. Целью освоения дисциплины «Теория функционала плотности и методы моделирования квантовых систем» является знакомство с фундаментами теории функционала плотности и ее применения для квантовых систем с помощью известными и общедоступными программами.

1.2. Трудоемкость в академических кредитах и часах, формы итогового контроля (экзамен/зачет);

3 академических кредита / 108 часа. Форма итогового контроля — зачет.

1.3. Взаимосвязь дисциплины с другими дисциплинами учебного плана специальности (направления)

"Нанотехнологии", "Квантовая механика" и "Численные методы в физике"

1.4. Результаты освоения программы дисциплины:

Код компетенции (в соответствии рабочим с учебным планом)	Наименование компетенции (в соответствии рабочим с учебным планом)	Код индикатора достижения компетенций (в соответствии рабочим с учебным планом)	Наименование индикатора достижений компетенций (в соответствии рабочим с учебным планом)
ОПК-3	Способен применять методы поиска, хранения, обработки, анализа и представления в требуемом формате информации из различных источников и баз данных, соблюдая при этом основные требования информационной	ОПК-3.1	Знает, как использовать информационно-коммуникационные технологии при поиске необходимой информации и современные принципы

	безопасности	ОПК-3.2 ОПК-3.3	поиска, хранения, обработки, анализа и представления в требуемом формате информации Умеет решать задачи обработки данных с помощью современных средств автоматизации Владеет навыками обеспечения информационной безопасности
ПК-2	Способен разрабатывать эффективные алгоритмы решения сформулированных задач с использованием современных языков программирования и обеспечивать их программную реализацию	ПК-2.1 ПК-2.2 ПК-2.3	Знает методы разработки эффективных алгоритмов решения научно-исследовательских задач Умеет использовать алгоритмы решения исследовательских задач с использованием современных языков программирования Владеет навыками разработки стратегии и методологии исследования изделий микро- и наноэлектроники

2. УЧЕБНАЯ ПРОГРАММА

2.1. Цели и задачи дисциплины

Целью освоения дисциплины «Теория функционала плотности и методы моделирования квантовых систем» является:

- Изучения основ моделирования квантовых систем
- Изучения теории функционала плотности
- Развития навыков использования специальных программ для расчета с теорией функционала плотности.

2.2. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы (в академических часах и зачетных единицах) *(удалить строки, которые не будут применены в рамках дисциплины)*

Виды учебной работы	Всего, в акад. часах	Распределение по семестрам
		1 сем
1	2	3
1. Общая трудоемкость изучения дисциплины по семестрам, в т. ч.:	108	108
1.1. Аудиторные занятия, в т. ч.:	64	64
1.1.1. Лекции	32	32
1.1.2. Практические занятия, в т. ч.	32	32
1.1.3. Лабораторные работы	-	-
1.2. Самостоятельная работа, в т. ч.:	44	44
1.3. Консультации		
Итоговый контроль (Экзамен, Зачет, диф. зачет - указать)	Зачет	

2.3. Содержание дисциплины

2.3.1. Тематический план и трудоемкость аудиторных занятий (модули, разделы дисциплины и виды занятий) по рабочему учебному плану

Разделы и темы дисциплины	Всего (ак. часов)	Лекции (ак. часов)	Практ. Занятия (ак. часов)
1	2=3+4+5+6 +7	3	4
Тема 1. Введения в моделирование	4	2	2
Тема .2. Операционная система Linux	8	4	4

Тема 3. Парные потенциалы	4	2	2
Тема 4. Многочастичная задача	4	2	2
Тема 5. Основы теории дфт	4	2	2
Тема 6. ДФТ в практике	8	4	4
Тема 7. Моделирования кристаллов	4	2	2
Тема 8 . Моделирования поверхностей	8	4	4
Тема 9. Использование Python-а моделировании	8	4	4
Тема 10. Моделирования фононов	4	2	2
Тема 11. Молекулярная динамика	4	2	2
ИТОГО	64	32	32

2.3.2. Краткое содержание разделов дисциплины в виде тематического плана

Тема 1. Введение в моделирование

Моделирование позволяет изучать физические системы с помощью математических и компьютерных методов. В этой лекции рассматриваются основные подходы к моделированию, их преимущества и ограничения.

Тема 2. Операционная система Linux

Linux – это мощная и гибкая среда для научных расчетов и моделирования. Лекция охватывает основы работы в терминале, управление файлами и пакетами, а также принципы работы с удаленными серверами.

Тема 3. Парные потенциалы

Парные потенциалы описывают взаимодействие между атомами и молекулами в системах конденсированных сред. Будут рассмотрены основные типы потенциалов (Леннард-Джонса, Морзе и др.) и их применение в расчетах.

Тема 4. Многочастичная задача

В сложных физических системах взаимодействуют многие частицы, что требует специальных методов моделирования. Лекция посвящена методам решения многочастичной задачи, включая методы Хартри-Фока.

Тема 5. Основы теории DFT

В лекции рассматриваются базовые принципы DFT теоремы Кона и Хоэнберга, Кона и Шама, включая аппроксимации LDA и GGA.

Тема 6. DFT на практике

Лекция посвящена практическому использованию DFT для расчета электронных структур и свойств материалов. Рассматриваются программные пакеты Quantum ESPRESSO и их настройка.

Тема 7. Моделирование кристаллов

Кристаллические материалы обладают периодической структурой, что упрощает их моделирование. В лекции рассматриваются базовые методы моделирования кристаллов, включая использование симметрии и базисных ячеек.

Тема 8. Моделирование поверхностей

Поверхности материалов имеют уникальные свойства, важные для катализа и нанотехнологий. Лекция охватывает методы построения моделей поверхностей и их изучения с помощью DFT.

Тема 9. Использование Python в моделировании

Python — удобный язык для численного моделирования благодаря библиотекам NumPy, SciPy и ASE. В лекции рассматриваются примеры использования Python для работы с атомными системами и анализа данных.

Тема 10. Моделирование фононов

Фононы описывают колебания атомов в твердом теле и влияют на теплопроводность и электронные свойства. Лекция посвящена расчету фононных спектров с помощью методов DFT и модели гармонических колебаний.

Тема 11. Молекулярная динамика

Молекулярная динамика позволяет моделировать эволюцию атомных систем во времени на основе законов классической механики. В лекции рассматриваются алгоритмы интегрирования уравнений движения и выбор силовых полей.

2.3.3. Краткое содержание семинарских/практических занятий/лабораторного практикума

Во время практических занятий студенты применяют знания, полученные во время лекций. Практические занятия в основном будут проводиться путем решения соответствующих задач в компьютерной аудитории. Некоторые темы/примеры будут продемонстрированы соответствующими примерами/моделями с помощью проектора.

2.3.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для эффективной организации проработок нужна компьютерная аудитория с проектором.

2.4. Модульная структура дисциплины с распределением весов по формам контролей

Формы контролей	Вес формы (форм) текущего контроля в результирующей оценке текущего контроля (по модулям)		Вес формы промежуточного контроля в итоговой оценке промежуточного контроля		Вес итоговой оценки промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей		Вес итоговой оценки промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей (семестровой оценке)	Веса результирующей оценки промежуточных контролей и оценки итогового контроля в результирующей оценке итогового контроля
	M1 ¹	M2	M1	M2	M1	M2		
Вид учебной работы/контроля								
Контрольная работа (при наличии)			0.5	0.5				
Устный опрос (при наличии)								
Лабораторные работы (при наличии)	0.5	0.5						
Письменные домашние задания (при наличии)								
Решение задач	0.5	0.5						
Веса результирующих оценок текущих контролей в итоговых оценках промежуточных контролей					0.5	0.5		
Веса оценок промежуточных контролей в итоговых оценках промежуточных контролей								
Вес итоговой оценки 1-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей							0.5	
Вес итоговой оценки 2-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей							0.5	
Вес результирующей оценки промежуточных контролей в результирующей оценке итогового контроля								0.5
Вес итогового контроля (Экзамен/зачет) в результирующей оценке итогового контроля								0.5
	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$

3. Теоретический блок (указываются материалы, необходимые для освоения учебной программы дисциплины)

3.1. Материалы по теоретической части курса

3.1.1. Учебник(и);

- Introduction to computational chemistry, Frank Jensen, 1998
- Essentials of computational chemistry theories and models, Christopher J. Cramer, 2002
- Density functional theory, a practical introduction, David S. Sholl and Janice A. Steckel, 2009

¹ Учебный Модуль

➤ Materials Modelling using Density Functional Theory, Feliciano Giustino, 2014

4. Фонды оценочных средств (указываются материалы, необходимые для проверки уровня знаний в соответствии с содержанием учебной программы дисциплины).

4.1. Планы практических и семинарских занятий

Установка программного обеспечения и знакомство с интерфейсом

- Установка Quantum ESPRESSO / ORCA / VASP / Gaussian
- Работа с входными и выходными файлами

Расчет электронной плотности простых атомов и молекул (H, He, H₂)

- Настройка расчетов
- Визуализация электронной плотности

Сравнение функционалов (LDA, GGA) на примере молекулы H₂O

- Анализ энергии и структуры
- Интерпретация результатов

Оптимизация геометрии молекул (NH₃, CO₂)

- Вычисление сил
- Критерии сходимости

Расчет структуры кристаллического кремния с периодическими условиями

- Подбор псевдопотенциала
- Определение решеточной постоянной

SCF-процедура: сходимость и выбор параметров

- Влияние параметров SCF (cutoff, mix, smearing)
- Поведение энергии на итерациях

Вакуумные условия при моделировании изолированных молекул и кластеров

- Расчет изолированной молекулы в ячейке
- Подбор размеров вакуума

Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь в димере воды

- Расчет энергии связи
- Сравнение с литературными данными

Расчет плотности состояний (DOS) и зонной структуры (Si, графен)

- Построение DOS
- Интерпретация зонных диаграмм

Распределение заряда: анализ Mulliken и Löwdin

- Расчет на молекуле формальдегида

- Сравнение методов

Моделирование оптических свойств: УФ-спектр молекулы бензола

- Расчет поглощения

- Построение спектра

Вибрационные спектры: расчет ИК-спектра молекулы воды

- Вычисление частот

- Идентификация активных мод

Расчет энергии связи и барьеров реакции (на примере H_2)

- Введение в NEB

- Энергия диссоциации

Расчет возбужденных состояний методом TDDFT (формальдегид)

- Определение уровней возбуждения

- Расчет флуоресцентного спектра

Индивидуальные проекты: моделирование молекулы или материала

- Подготовка расчетов

- Представление результатов

4.2. Вопросы и задания для самостоятельной работы студентов

- ✓ Сформулируйте основные постулаты теории функционала плотности.
- ✓ В чем заключается физический смысл уравнений Кона–Шэма?
- ✓ Сравните приближения LDA, GGA и гибридных функционалов.
- ✓ Что такое псевдопотенциал и зачем он используется в DFT-расчетах?
- ✓ Объясните понятие самосогласованного поля (SCF) и критерии его сходимости.
- ✓ Какие граничные условия применяются при моделировании кристаллов и молекул?
- ✓ Чем отличается одночастичная энергия от полной энергии системы?
- ✓ Как рассчитываются оптические свойства в рамках DFT?
- ✓ Как интерпретировать плотность состояний (DOS) и зонную диаграмму?
- ✓ Объясните различия между методами Mulliken, Löwdin и Bader при анализе распределения заряда.
- ✓ В чем особенности моделирования возбужденных состояний и как применяется TDDFT?
- ✓ Как проводится расчет вибрационных спектров в рамках DFT?

4.3. Образцы вариантов контрольных работ, тестов и/или других форм текущих и промежуточных контролей

- ✓ Провести расчет энергии и оптимизации геометрии молекулы CO₂ с использованием двух разных функционалов (LDA и GGA). Сравнить результаты.
- ✓ Выполнить расчет плотности состояний (DOS) для кристаллического кремния. Построить график и охарактеризовать ширину запрещенной зоны.
- ✓ Определить частоты колебаний молекулы H₂O и указать, какие из них активны в ИК-спектре.
- ✓ Смоделировать водородную связь в димере воды и рассчитать энергию взаимодействия.
- ✓ Провести анализ Mulliken и Löwdin для молекулы аммиака и сравнить распределение электронного заряда.
- ✓ Рассчитать УФ-спектр бензола методом TDDFT и определить основные полосы поглощения.
- ✓ Подготовить отчет о сравнении SCF-сходимости при разных параметрах (cutoff, mixing, smearing) для молекулы CH₄.
- ✓ Построить модель поверхности Si(100) и рассчитать плотность электронного состояния для неё.
- ✓ Смоделировать реакционный путь для диссоциации H₂ и рассчитать энергетический барьер.
- ✓ Разработать собственный расчетный проект (молекула или материал по выбору) и представить краткий письменный отчет с результатами.

4.4. Перечень экзаменационных вопросов

1. Сформулируйте основные постулаты теории функционала плотности (DFT).
2. Объясните теорему Хоэнберга–Кона и её значение для DFT.
3. Выведите уравнения Кона–Шэма и объясните физический смысл каждого слагаемого.
4. Что такое функционал обменно-корреляционной энергии? Примеры LDA, GGA, гибридных функционалов.
5. Поясните, в чём заключается метод самосогласованного поля (SCF) в DFT-расчётах.
6. Что такое псевдопотенциал и какие его основные типы? Зачем он используется?
7. Объясните разницу между моделированием молекул и кристаллов в DFT. Какие граничные условия применяются?
8. Что такое плотность электронных состояний (DOS)? Как она рассчитывается и интерпретируется?
9. Расскажите о способах анализа распределения электронного заряда (Mulliken, Löwdin, Bader).
10. Опишите метод оптимизации геометрии в DFT. Какие критерии сходимости используются?
11. В чём особенности расчёта оптических свойств (поглощения, флуоресценции) в рамках DFT?
12. Что такое TDDFT? В каких случаях применяется и какие возможности предоставляет?
13. Объясните, как рассчитываются вибрационные спектры молекул в рамках DFT.
14. Что такое NEB (Nudged Elastic Band) метод и как он используется для поиска переходных состояний?
15. В чём заключаются отличия между одночастичными и возбуждёнными состояниями системы в DFT?

4.5. Образцы экзаменационных билетов

ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
Кафедра общей физики и квантовых наноструктур

Направление: Электроника и нанoeлектроника
Дисциплина: Теория функционала плотности и методы моделирования квантовых систем
(бакалавриат IV-ый курс, I-ый семестр)

Экзаменационный билет № **

1. Что такое псевдопотенциал и какие его основные типы? Зачем он используется?
2. Что такое плотность электронных состояний (DOS)? Как она рассчитывается и интерпретируется?
3. В чём заключаются отличия между одночастичными и возбуждёнными состояниями системы в DFT?

Зав. кафедройОФКН _____Д.Б. Айрапетян
20__г.
