Программа учебной дисциплины  
 «Физические основы моделирования зонной структуры твёрдых тел»

Утверждена

Академическим руководителем ОП

Протокол № « » от г.

|  |  |
| --- | --- |
| Автор | Павловский В.В. |
| Дата утверждения |  |
| Число кредитов | 5 з.е. |
| Контактная работа (час.) | 40 |
| Самостоятельная работа (час.) | 40 |
| Курс | 1 |
| Формат изучения дисциплины | Без использования онлайн курса |

I. ЦЕЛЬ, РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И ПРЕРЕКВИЗИТЫ

Целями освоения дисциплины «Физические основы моделирования зонной структуры твёрдых тел» являются:

* Знакомство студентов с физическими концепциями систем взаимодействующих электронов в периодических и апериодических потенциалах;
* Знакомство студентов с основными физическими моделями многоэлектронных систем;
* Знакомство студентов с концепциями, лежащими в основе разработки алгоритмов приближённых вычислений физических свойств твёрдых тел;
* формирование у студентов профессиональных компетенций, связанных с разработкой моделей расчётов физических характеристик конкретных типов кристаллических твёрдых тел.

В результате освоения дисциплины студент должен:

**знать:**

- основные принципы теории пространственно-периодических систем взаимодействующих электронов;

- основные физические модели многоэлектронных систем;

- физические основы основных алгоритмов, используемых для моделирования свойств твёрдых тел;

**уметь:**

- разрабатывать модели расчётов физических характеристик конкретных типов кристаллических твёрдых тел;

**владеть:**

- навыками математического моделирования различных типов электронных состояний в твёрдых телах.

Изучение дисциплины «Физические основы моделирования зонной структуры твёрдых тел» базируется на следующих дисциплинах:

* в области физики: квантовая физика, термодинамика, основы физики твёрдого тела, статистическая физика;
* в области математики: основы математического анализа (ряды, интегралы, преобразование Фурье), основы теории функций комплексного переменного, решение дифференциальных уравнений, векторный анализ, вариационное исчисление;
* в области программирования и вычислительной техники: основы программирования на языке Python, методы работы в командной строке операционной системы Linux, основы техники распределённых вычислений, методы использования виртуальных машин;

Для освоения учебной дисциплины студенты должны владеть следующими знаниями и компетенциями:

* знания в области физики: квантовая физика, термодинамика, основы физики твёрдого тела, статистическая физика;
* знания в области математики: основы математического анализа (ряды, интегралы, преобразование Фурье), основы теории функций комплексного переменного, решение дифференциальных уравнений, векторный анализ, вариационное исчисление;
* общепрофессиональные компетенции: умение работать с литературой (в том числе англоязычной).

II. СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

**Раздел 1** Периодические структуры и параметры кристаллической решётки. Примитивные элементарные ячейки и суперячейки. Объёмоцентрированные и гранецентрированные кубические ячейки. Гексагональные ячейки. Методы предсказания кристаллической структуры материалов. Оптимизация структуры элементарной ячейки. Оптимизация объёма и формы элементарной ячейки. Внутренние степени свободы. Ограничения при оптимизации.

**Раздел 2** Моделирование структуры поверхности кристалла. Модель двумерной кристаллической пластины. Классификация поверхностей по индексам Миллера. Выбор элементарной ячейки. Выбор сетки блоховских векторов. Оптимизация структуры поверхности пластины. Вычисление поверхностной энергии. Возникновение нефизических дипольных моментов и симметричная модель пластины. Реконструкция поверхности. Поверхностные электронные состояния. Локализованные и протяжённые состояния. Локальная плотность состояний. Моделирование данных сканирующей туннельной спектроскопии.

**Раздел 3** Моделирование фононных спектров. Законы дисперсии фононных мод. Акустические и оптические фононы. Поверхностные колебательные моды. Колебательные моды молекул, абсорбированных на поверхности. Электрон-фононное взаимодействие и его вклад в электрическое сопротивление металлов.

**Раздел 4** Электронные состояния в диэлектриках. Запрещённая зона. Прямая (оптическая) и непрямая (фундаментальная) энергетические щели. Корректное вычисление ширины запрещённой зоны с помощью гибридных функционалов. Проекции электронных состояний на атомные орбитали. Спиновый магнетизм. Коллинеарный и неколлинеарный магнетизм. Спин-орбитальное взаимодействие и расщепление электронных зон в кристаллах с тяжёлыми атомами. Поверхностные топологические состояния.

III. ОЦЕНИВАНИЕ

Итоговая оценка (ИО) по курсу складывается накопительным образом из оценок за работу в ходе семестра (ОС) и оценку за экзамен (ОЭ) и равна ИО=0.5 ОС+0.5 ОЭ.

Оценка за работу в семестре равна ОС= (Пр+Сем), Пр и Сем – оценки за реферативные доклады (проектную деятельность) и текущую работу на семинарах, соответственно.

Студенты, у которых ОС = 10, освобождаются от устного экзамена и получают итоговую оценку 10. Студенты c оценкой ОС = 8 или ОС = 9 могут отвечать только на половину билета (1 вопрос, по выбору) на устном экзамене.

Оценки за работу в семестре и итоговая оценка округляются арифметически (при превышении целого числа менее чем на 0.5 балла — в меньшую сторону, при превышении на 0.5 балла и более — в большую).

IV. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Примеры вопросов для оценки качества освоения дисциплины

* Что вычисляется на каждой отдельной итерации процесса вычисления электронной плотности?
* Какие критерии служат основанием для прекращения итераций в при самосогласованном вычислении электронной плотности?
* Какая пространственная структура в действительности используется для вычислений электронной структуры кристаллической пластины?
* Какой смысл имеют вычисленные собственные значения (Eigenvalues) и где их найти ?
* Для каких блоховских векторов вычисляются собственные значения ?
* Каким образом вычисляется амплитуда блоховской функции  и какой параметр входного файла отвечает за её вычисление?
* Какая команда позволяет извлекать кристаллическую структуру из выходных файлов ( и каких?) ?
* В каких выходных файлах можно найти параметры кристаллической структуры в явном текстовом виде и как это сделать?
* Объяснить полученное распределение электронной плотности с точки зрения химической связи в кристалле.

V.  РЕСУРСЫ

Основная литература

# Н. Ашкрофт Н. Мермин Физика твёрдого тела

# D. S. Sholl J. A. Steckel. Density functional theory. A Practical Introduction

# R M Martin. Electronic Structure Basic Theory and Practical Method

Дополнительная литература

# F. Giustino. Materials Modelling using Density Functional Theory

# W. Koch, M. C. Holthausen . A Chemist's Guide to Density Functional Theory

# R. G. Parr, W. Yang. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules

# E. Engel R. M. Dreizler. Density Functional Theory. An Advanced Course

# M Springborg. Methods of Electronic-Structure Calculations-From Molecules to Solids

Программное обеспечение

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **№п/п** | **Наименование** | **Условия доступа** |
| 1. | Microsoft Windows 7 Professional RUS  Microsoft Windows 10  Microsoft Windows 8.1 Professional RUS | *Из внутренней сети университета (договор)* |
| 2. | Microsoft Office Professional Plus 2010 | *Из внутренней сети университета (договор)* |
| 3 | Ubuntu Linux | *Из внутренней сети ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН* |

Профессиональные базы данных, информационные справочные системы, интернет-ресурсы (электронные образовательные ресурсы)

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **№ п/п** | **Наименование** | **Условия доступа** |
|  | ***Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы*** | |
| 1. | Библиотека НИУ ВШЭ | URL: https://library.hse.ru/e-resources |
|  | ***Интернет-ресурсы (электронные образовательные ресурсы)*** | |
| 1. | Открытое образование | URL: https://openedu.ru/ |
| 2. | The Materials Project | URL: https://next-gen.materialsproject.org/ |
| 3. | AbInit | URL : https://www.abinit.org/ |
|  | MaterialsCloud | URL : https://www.materialscloud.org/home |

Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории для учебных занятий по дисциплине обеспечивают использование и демонстрацию тематических иллюстраций, соответствующих программе дисциплины в составе:

ПЭВМ с доступом в Интернет (операционная система, офисные программы, антивирусные программы);

мультимедийный проектор с дистанционным управлением.

Учебные аудитории для лабораторных и самостоятельных занятий по дисциплине оснащены ПЭВМ, с программным обеспечением, описанным выше, а также с возможностью подключения к сети Интернет и доступом к электронной информационно-образовательной среде НИУ ВШЭ.

**VI. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ И ИНВАЛИДОВ**

В случае необходимости, обучающимся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (по заявлению обучающегося), а для инвалидов также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида, могут предлагаться следующие варианты восприятия учебной информации с учетом их индивидуальных психофизических особенностей, в том числе с применением электронного обучения и дистанционных технологий:

6.1.    для лиц с нарушениями зрения: в печатной форме увеличенным шрифтом; в форме электронного документа; в форме аудиофайла (перевод учебных материалов в аудиоформат); в печатной форме на языке Брайля; индивидуальные консультации с привлечением тифлосурдопереводчика; индивидуальные задания и консультации.

6.2.    для лиц с нарушениями слуха: в печатной форме; в форме электронного документа; видеоматериалы с субтитрами; индивидуальные консультации с привлечением сурдопереводчика; индивидуальные задания и консультации.

6.3.    для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата: в печатной форме; в форме электронного документа; в форме аудиофайла; индивидуальные задания и консультации.