## Рабочая программа дисциплины

- 1. Название дисциплины: "Квантово-механические методы исследования наноструктур".
- 2. Уровень высшего образования подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.
- 3. Направление подготовки: 03.06.01 «Физика и Астрономия». Научная специальность: <u>01.04.07</u>, <u>05.13.18</u>.
- 4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: курс относится к дисциплинам научной специальности вариативной части Блока 1, по результатам освоения которых обучающиеся сдают кандидатский экзамен по научной специальности.
- 5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников).

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения по					
(код компетенции)	дисциплине					
УК-1	31 (УК-1) Знать методы критического					
	анализа и оценки современных научных					
	достижений, а также методы					
	генерирования новых идей при решении					
	исследовательских и практических задач в					
	области физики наноструктур.					
	У1 (УК-1) <b>Уметь</b> анализировать					
	альтернативные варианты решения					
	исследовательских и практических задач и					
	оценивать потенциальные					
	выигрыши/проигрыши реализации этих					
	вариантов при исследовании					
	наноструктур.					
	В1 (УК-1) <b>Владеть</b> навыками анализа					
	методологических проблем, возникающих					
	при решении исследовательских и					
	практических задач, в том числе в					

	междисциплинарных областях
	(конденсированное состояние вещества,
AMC 0	магнитные явления, физика наносистем).
УК-3	31 (УК-3) Знать особенности
	представления результатов научной
	деятельности в устной и письменной
	форме при работе в российских и
	международных исследовательских
	коллективах в области физики
	наноструктур.
	У1 (УК-3) <b>Уметь</b> следовать нормам,
	принятым в научном общении при работе
	в российских и международных
	исследовательских коллективах с целью
	решения научных и научно-
	образовательных задач в области физики
	наноструктур.
	В1 (УК-3) <b>Владеть</b> навыками анализа
	основных мировоззренческих и
	методологических проблем, в.т.ч.
	междисциплинарного характера,
	возникающих при работе по решению
	научных и научно-образовательных задач
	в российских или международных
	исследовательских коллективах в области
	физики наноструктур.
УК-5	31 (УК-5) Знать содержание процесса
	целеполагания профессионального и
	личностного развития, его особенности и
	способы реализации при решении
	профессиональных задач, исходя из этапов
	карьерного роста и требований рынка
	труда в сфере применения физики
	пруби в сфере применения физики

	uauacmnyemyn
	наноструктур.
	У1 (УК-5) <b>Уметь</b> формулировать цели
	личностного и профессионального
	развития и условия их достижения, исходя
	из тенденций развития области
	профессиональной деятельности, этапов
	профессионального роста, индивидуально-
	личностных особенностей в сфере
	применения физики наноструктур.
	B1 (УК-5) <b>Владеть</b> приемами и
	технологиями целеполагания,
	целереализации и оценки результатов
	деятельности по решению
	профессиональных задач в сфере
	применения физики наноструктур.
ОПК-1	Знать основные квантово-механические
	методы исследования наноструктур, их
	физические принципы и математический
	annapam.
	Уметь применять квантово-
	механические методы исследования
	наноструктур к решению конкретных
	задач в области физики наносистем.
	Владеть методиками построения
	математических моделей, используемых
	для исследования квантово-механических
	свойств наноструктур.

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 36 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (32 часов занятия лекционного типа, 4 часов занятия семинарского типа (семинары, научно-практические занятия, лабораторные работы и т.п.), 4 часа групповые консультации, 4 часов индивидуальные консультации, 4 часа мероприятия текущего

контроля успеваемости, 36 часов мероприятия промежуточной аттестации), 60 часов составляет самостоятельная работа аспиранта. Форма отчетности по всем дисциплинам <u>зачет с оценкой</u>.

- 7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.
- 8. Формат обучения: очный, дистанционное обучение не предусмотрено.
- 9. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий.

Наименование и	Всего					В том чи	сле			
краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),	(часы)	]	Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них				ии с	Самостоятельная рабо обучающегося, часы из них		работа
форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости коллоквиумы, практические контрольные занятия и др)*	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготов- ка рефератов и т.п	Всего
Тема 1. Основы   формализма теории   функционала электронной   плотности (ТФЭП).	18	8	1	1	1	1	12	4	2	6

Теоремы Хоэнберга- Кона. Уравнение Кона- Шэма. Приближение локальной плотности и обобщенное градиентное приближение.										
Тема 2. Обобщение ТФЭП на более сложные случаи. Спин-поляризованная ТФЭП. ТФЭП при конечных температурах. Описание явлений, зависящих от времени. Функционалы, зависящие от плотности тока. Релятивистские поправки в ТФЭП.	18	8	1	1	1	1	12	4	2	6
Тема 3. Комбинации ТФЭП с другими методами. Комбинация ТФЭП с методом молекулярной динамики. Метод Кара-Парринелло. Комбинация ТФЭП с моделью Хаббарда.	18	8	1	1	1	1	12	4	2	6

Тема 4.	18	8	1	1	1	1	12	4	2	6
Псевдопотенциалы.										
Основные свойства псевдопотенциалов и их										
применение. Мягкие и										
ультрамягкие										
псевдопотенциалы.										
PAW потенциалы.										
Промежуточная аттестация								36		
Итого	108	32	4	4	4	4	48	52	8	60

## 10. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы аспирантов по дисциплине.

Практическая самостоятельная работа аспиранта проводится в виде самостоятельной проработки тем дисциплины по предложенным аспирантам учебным материалам (см. в п.12 перечень основной и дополнительной учебной литературы). Текущий контроль осуществляется путем индивидуального обсуждения с преподавателем выполненного ПСР или путем групповой дискуссии в группе аспирантов при участии преподавателя. Типовые задания для ПСР определяются списком вопросов и заданий по курсу, приведенным в п.11:

# 11. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине.

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТ	ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ *			
	2	3	4	5	
31 (УК-1) Знать	Фрагментарные	Общие, но не	Сформированные, но	Сформированные	Индивидуальное
методы	знания методов	собеседование,			
критического	критического	знания методов	отдельные пробелы	знания методов	письменные

анализа и оценки ан	ализа и оценки	критического анализа	знания основных	критического	ответы на
современных сое	временных	и оценки современных	методов критического	анализа и оценки	вопросы,
научных на	учных	научных достижений,	анализа и оценки	современных	рейтинг
достижений, а до	стижений, а	а также методов	современных научных	научных	
также методы та	акже методов	генерирования новых	достижений, а также	достижений, а	
генерирования новых ген	нерирования новых	идей при решении	методов	также методов	
идей при решении ид	ей при решении	исследовательских и	генерирования новых	генерирования новых	
исследовательских и исс	следовательских и	практических задач	идей при решении	идей при решении	
практических задач пр	актических задач		исследовательских и	исследовательских и	
в области физики			практических задач, в	практических задач,	
наноструктур.			том числе	в том числе	
			междисциплинарных.	междисциплинарных	
У1 (УК-1) <b>Уметь</b> Ча	астично освоенное	В целом успешно, но не	В целом успешно, но	Сформированное	Индивидуальное
анализировать ум	<i>иение</i>	систематически	содержащие	умение	собеседование,
альтернативные ан	ализировать	осуществляемые	отдельные пробелы	анализировать	письменные
варианты решения ал	ьтернативные	анализ	анализ	альтернативные	ответы на
исследовательских и вад	рианты решения	альтернативных	альтернативных	варианты решения	вопросы,
практических задач исс	следовательских и	вариантов решения	вариантов решения	исследовательских и	рейтинг
и оценивать пр	актических задач	исследовательских и	исследовательских	практических задач	
потенциальные и	оценивать	практических задач и	задач и оценка	и оценивать	
выигрыши/проигрыш по	тенциальные	оценка потенциальных	потенциальных	потенциальные	
	игрыши/проигрыш	выигрышей/проигрыше	выигрышей/проигрыше	выигрыши/проигрыш	
вариантов при и	реализации этих	й реализации этих	й реализации этих	и реализации этих	
исследовании вар	риантов	вариантов	вариантов	вариантов	
наноструктур.		-	-	-	
В1 (УК-1) Владеть Фр	рагментарное	В целом успешное, но	В целом успешное, но	Успешное и	Индивидуальное
1 1 1	именение навыков	не систематическое	содержащее	систематическое	собеседование,
	ализа	применение навыков	отдельные пробелы	применение навыков	письменные
проблем, ме	гтодологических	анализа	применение навыков	анализа	ответы на
возникающих при пр	облем,	методологических	анализа	методологических	вопросы,
решении воз	зникающих при	проблем, возникающих	методологических	проблем,	рейтинг
исследовательских и рег	шении	при решении	проблем, возникающих	возникающих при	

практических задач,	исследовательских и	исследовательских и	при решении	решении	
в том числе в	практических задач	практических задач	исследовательских и	исследовательских и	
междисциплинарных			практических задач	практических задач,	
областях				в том числе в	
(конденсированное				междисциплинарных	
состояние вещества,				областях	
магнитные явления,					
физика наносистем).					
31 (УК-3) <b>Знать</b>	Фрагментарные	Неполные знания	Сформированные, но	Сформированные и	Индивидуальное
особенности	знания особенностей	особенностей	содержащие	систематические	собеседование,
представления	предоставления	представления	отдельные пробелы	знания особенностей	письменные
результатов	результатов	результатов научной	знания основных	представления	ответы на
научной	научной	деятельности в	особенностей	результатов	вопросы,
деятельности в	деятельности в	устной и письменной	представления	научной	рейтинг
устной и письменной	устной и письменной	форме, при работе в	результатов научной	деятельности в	
форме при работе в	форме	российских и	деятельности в	устной и письменной	
российских и		международных	устной и письменной	форме при работе в	
международных		коллективах	форме при работе в	российских и	
исследовательских			российских и	международных	
коллективах в			международных	исследовательских	
области физики			исследовательских	коллективах	
наноструктур.			коллективах		
V1 (УК-3) <b>Уметь</b>	Фрагментарное	В целом успешное, но	В целом успешное, но	Успешное и	Индивидуальное
следовать нормам,	следование нормам,	не систематическое	содержащее	систематическое	собеседование,
принятым в научном	принятым в научном	следование нормам,	отдельные пробелы	следование нормам,	письменные
общении при работе	общении при работе	принятым в научном	умение следовать	принятым в научном	ответы на
в российских и	в российских и	общении при работе в	основным нормам,	общении, для	вопросы,
международных	международных	российских и	принятым в научном	успешной работы в	рейтинг
исследовательских	исследовательских	международных	общении при работе в	российских и	
коллективах с целью	коллективах с целью	исследовательских	российских и	международных	
решения научных и	решения научных и	коллективах с целью	международных	исследовательских	
научно-	научно-	решения научных и	исследовательских	коллективах с целью	
образовательных	образовательных	научно-	коллективах с целью	решения научных и	

задач в области	задач	образовательных	решения научных и	научно-	
физики		задач	научно-	образовательных	
наноструктур.			образовательных	задач	
			задач		
<b>В1</b> (УК-3) <b>В</b> ладеть	Фрагментарное	В целом успешное, но	В целом успешное, но	Успешное и	Индивидуальное
навыками анализа	применение навыков	не систематическое	сопровождающееся	систематическое	собеседование,
основных	анализа основных	применение навыков	отдельными	применение навыков	письменные
мировоззренческих и	мировоззренческих и	анализа основных	ошибками применение	анализа основных	ответы на
методологических	методологических	мировоззренческих и	навыков анализа	мировоззренческих и	вопросы,
проблем, в.т.ч.	проблем, в т.ч.	методологических	основных	методологических	рейтинг
междисциплинарног	междисциплинарног	проблем, в т.ч.	мировоззренческих и	проблем, в т.ч.	
о характера,	о характера,	междисциплинарного	методологических	междисциплинарног	
возникающих при	возникающих при	характера,	проблем, в т.ч.	о характера,	
работе по решению	работе по решению	возникающих при	междисциплинарного	возникающих при	
научных и научно-	научных и научно-	работе по решению	характера,	работе по решению	
образовательных	образовательных	научных и научно-	возникающих при	научных и научно-	
задач в российских	задач в российских	образовательных	работе по решению	образовательных	
или международных	или международных	задач в российских или	научных и научно-	задач в российских	
исследовательских	исследовательских	международных	образовательных	или международных	
коллективах в	коллективах	исследовательских	задач в российских или	исследовательских	
области физики		коллективах	международных	коллективах	
наноструктур.			исследовательских		
			коллективах		
31 (УК-5) Знать	Допускает	Демонстрирует	Демонстрирует	Раскрывает полное	Индивидуальное
содержание	существенные	частичные знания	знания сущности	содержание	собеседование,
процесса	ошибки при	содержания процесса	процесса	процесса	письменные
целеполагания	раскрытии	целеполагания,	целеполагания,	целеполагания, всех	ответы на
профессионального и	содержания	некоторых	отдельных	его особенностей,	вопросы,
личностного	процесса	особенностей	особенностей	аргументированно	рейтинг
развития, его	целеполагания, его	профессионального	процесса и способов	обосновывает	
особенности и	особенностей и	развития и	его реализации,	критерии выбора	
способы реализации	способов реализации.	самореализации	характеристик	способов	
при решении		личности,	профессионального	профессиональной и	

1					
профессиональных		указывает способы	развития личности, но	личностной	
задач, исходя из		реализации, но не	не выделяет критерии	целереализации при	
этапов карьерного		может обосновать	выбора способов	решении	
роста и требований		возможность их	целереализации при	профессиональных	
рынка труда в сфере		использования в	решении	задач.	
применения физики		конкретных	профессиональных		
наноструктур.		ситуациях.	задач.		
V1 (УК-5) <b>Уметь</b>	Имея базовые	При формулировке целей	Формулирует цели	Готов и умеет	Индивидуальное
формулировать цели	представления о	профессионального и	личностного и	формулировать цели	собеседование,
личностного и	тенденциях развития	личностного развития	профессионального	личностного и	письменные
профессионального	профессиональной	не учитывает	развития, исходя из	профессионального	ответы на
развития и условия	деятельности и	тенденции развития	тенденций развития	развития и условия их	вопросы,
их достижения,	9manax	сферы	сферы	достижения, исходя из тенденций	рейтинг
исходя из тенденций	профессионального роста, не способен	профессиональной деятельности и	профессиональной деятельности и	из тенденций развития области	
развития области	сформулировать цели	деятельности и индивидуально-	деятельности и индивидуально-	развития ооласти профессиональной	
профессиональной	профессионального и	личностные	личностных	деятельности, этапов	
деятельности,	личностного	особенности.	особенностей, но не	профессионального	
этапов	развития.	ocoociiiociiii.	полностью учитывает	роста, индивидуально-	
профессионального	F		возможные этапы	личностных	
роста,			профессиональной	особенностей.	
индивидуально-			социализации.		
личностных					
особенностей в					
сфере применения					
физики					
наноструктур.					
В1 (УК-5) <b>В</b> ладеть	Владеет	Владеет отдельными	Владеет приемами и	Демонстрирует	Индивидуальное
приемами и	отдельными	приемами и	технологиями	владение системой	собеседование,
технологиями	приемами и	технологиями	целеполагания,	приемов и	письменные
целеполагания,	<i>технологиями</i>	целеполагания,	целеполигиния, целереализации и	триемов и технологий	ответы на
целеполагания, и	целеполагания,	целенолигания, и	оценки результатов	<i>щелеполагания,</i>	вопросы,
, <u>+</u> ,	<i>'</i>	, 1		,	рейтинг
оценки результатов	целереализации и	оценки результатов		целереализации и	реитинс
деятельности по	оценки результатов	деятельности по	решению	оценки результатов	

решению	деятельности по	решению	стандартных	деятельности по	
профессиональных	решению	стандартных	профессиональных	решению	
задач в сфере	стандартных	профессиональных	задач, полностью	нестандартных	
применения физики	профессиональных	задач, давая не	аргументируя	профессиональных	
наноструктур.	задач, допуская	полностью	предлагаемые	задач, полностью	
	ошибки при выборе	аргументированное	варианты решения.	аргументируя выбор	
	приемов и	обоснование		предлагаемого	
	технологий и их	предлагаемого		варианта решения.	
	реализации.	варианта решения.			
ОПК-1. Знать	Допускает	Допускает отдельные	Демонстрирует	Демонстрирует	Индивидуальное
основные квантово-	существенные	ошибки при описании	знание сущности при	знание сущности	собеседование,
механические	ошибки при	соответствующих	описании	при описании	письменные
методы	описании	методов.	соответствующих	соответствующих	ответы на
исследования	соответствующих		методов в	методов	вопросы,
наноструктур, их	методов.		стандартных	нестандартных	рейтинг
физические			ситуациях.	ситуациях.	
принципы и					
математический					
annapam.					
ОПК-1. Уметь	Допускает	Допускает отдельные	Демонстрирует	Демонстрирует	Индивидуальное
применять	существенные	ошибки при	знание сущности при	знание сущности	собеседование,
квантово-	ошибки при	применении	применении	при применении	письменные
механические	применении	соответствующих	соответствующих	соответствующих	ответы на
методы	соответствующих	методов.	методов в	методов	вопросы,
исследования	методов.		стандартных	нестандартных	рейтинг
наноструктур к			ситуациях.	ситуациях.	
решению					
конкретных задач в					
области физики					
наносистем.	П	П	77	77	<i>II</i> )
ОПК-1. Владеть	Допускает	Допускает отдельные	Демонстрирует	Демонстрирует	Индивидуальное
методиками	существенные	ошибки при	знание сущности при	знание сущности	собеседование,
построения	ошибки при	использовании	использовании	при использовании	письменные

математических моделей, используемых для исследования квантово-механических	использовании соответствующих методик.	соответствующих методик.	соответствующих методик в стандартных ситуациях.	соответствующих методик нестандартных ситуациях.	ответы н вопросы, рейтинг	ia
свойств наноструктур.						

• Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения, характеризующих этапы формирования компетенций

#### Вопросы и задания по курсу:

- 1. В чем состоит основная идея теории функционала электронной плотности?
- 2. Сформулируйте и докажите теоремы Хоэнберга-Кона.
- 3. Напишите систему уравнений Кона-Шэма.
- 4. Как выглядит обменно-корреляционный функционал в приближении локальной плотности?
- 5. Как выглядит обменно-корреляционный функционал в обобщенном градиентном приближении?
- 6. Запишите уравнения Кона-Шема для Спин-поляризованной ТФЭП.
- 7. Опишите основные идеи построения ТФЭП при конечных температурах.
- 8. Как в рамках  $T\Phi \ni \Pi$  можно описывать явления, зависящие от времени?
- 9. Каким образом можно построить функционалы, зависящие от плотности тока?
- 10. Как можно сформулировать ТФЭП в релятивистском случае?
- 11. Напишите основные релятивистские поправки к функционалу энергии.
- 12. Каким образом можно использовать ТФЭП совместно с методом молекулярной динамики?
- 13. Напишите основные уравнения метода Кара-Парринелло.
- 14. Каким образом можно использовать ТФЭП совместно с моделью Хаббарда?
- 15. Что такое Псевдопотенциалы? Зачем они нужны?
- 16. Сформулируйте основные свойства псевдопотенциалов.
- 17. Что такое мягкие и ультрамягкие псевдопотенциалы?
- 18. Что такое PAW потенциалы? Сформулируйте их свойства.

• Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения Презентации методических материалов к основным разделам и темам дисциплины. Доступны для обучающихся на сайте научной группы после изложения соответствующего раздела дисциплины.

## 12. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и дополнительной учебной литературы
- 1. В. Кон, Электронная структура вещества волновые функции и функционалы плотности, УФН 172, 336 (2002).
- 2. С. Лундквист, Н. Марч, Теория неоднородного электронного газа, М. «Мир», 1987.
- 3. R. Parr, W. Yang, Density-functional theory of atoms and molecules, Oxford University Press, 1989.
- 4. E. Engel, R. Dreizler, Density Functional Theory. An Advanced Course, Springer, 2011.
- 5. R. Car, M. Parrinello, Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory, Phys. Rev. Lett. 55, 2471 (1985).
- 6. В. Хейне, М. Коэн, Д. Уэйр, Теория псевдопотенциала, М: Мир, 1973.
- 7. D. Vanderbilt, Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism, Phys. Rev. B 41, 7892 (1990).
- 8. G. Kresse, D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method, Phys. Rev. B 59, 1758 (1999).
- 9. P. Blöchl, Projector augmented-wave method, Phys. Rev. B 50, 17953 (1994).
- Описание материально-технической базы. Проекционное оборудование, ноутбук и маркерная доска.
- 13. Язык преподавания. Русский.
- 14. Преподаватель (преподаватели). Колесников Сергей Владимирович, кандидат физ.-мат. наук, кафедра общей физики.