

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: 01.04.07, 05.13.18.
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 (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
УК-1	<i>З1 (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.</i> <i>У1 (УК-1) Уметь анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов при исследовании наноструктур.</i> <i>В1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в</i>

	<p><i>междисциплинарных областях (конденсированное состояние вещества, магнитные явления, физика наносистем).</i></p>
УК-3	<p><i>З1 (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.</i></p> <p><i>У1 (УК-3) Уметь 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.</i></p> <p><i>В1 (УК-3) Владеть 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.</i></p>
УК-5	<p><i>З1 (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</i></p>

	<p>наноструктур.</p> <p>У1 (УК-5) Уметь формулировать цели личного 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.</p> <p>В1 (УК-5) Владеть приемами и технологиями целеполагания, целереализации и оценки результатов деятельности по решению профессиональных задач в сфере применения физики наноструктур.</p>
ОПК-1	<p>Знать основные квантово-механические методы исследования наноструктур, их физические принципы и математический аппарат.</p> <p>Уметь применять квантово-механические методы исследования наноструктур к решению конкретных задач в области физики наносистем.</p> <p>Владеть методиками построения математических моделей, используемых для исследования квантово-механических свойств наноструктур.</p>

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 зачет с оценкой.

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 краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		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	Подготовка 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. Псевдопотенциалы. Основные свойства псевдопотенциалов и их применение. Мягкие и ультрамягкие псевдопотенциалы. PAW потенциалы.	18	8	1	1	1	1	12	4	2	6
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)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания				ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ *
	2	3	4	5	
З1 (УК-1) <i>Знать</i> методы критического	Фрагментарные знания методов критического	Общие, но не структурированные знания методов	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы	Сформированные систематические знания методов	Индивидуальное собеседование, письменные

<p>анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в области физики наноструктур.</p>	<p>анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач</p>	<p>критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач</p>	<p>знания основных методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе междисциплинарных.</p>	<p>критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе междисциплинарных .</p>	<p>ответы на вопросы, рейтинг</p>
<p>У1 (УК-1) Уметь анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши и реализации этих вариантов при исследовании наноструктур.</p>	<p>Частично освоенное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши и реализации этих вариантов</p>	<p>В целом успешно, но не систематически осуществляемые анализ альтернативных вариантов решения исследовательских и практических задач и оценка потенциальных выигрышей/проигрышей и реализации этих вариантов</p>	<p>В целом успешно, но содержащие отдельные пробелы анализ альтернативных вариантов решения исследовательских задач и оценка потенциальных выигрышей/проигрышей и реализации этих вариантов</p>	<p>Сформированное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши и реализации этих вариантов</p>	<p>Индивидуальное собеседование, письменные ответы на вопросы, рейтинг</p>
<p>В1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и</p>	<p>Фрагментарное применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков анализа методологических проблем, возникающих</p>	<p>Успешное и систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при</p>	<p>Индивидуальное собеседование, письменные ответы на вопросы, рейтинг</p>

<p>практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (конденсированное состояние вещества, магнитные явления, физика наносистем).</p>	<p>исследовательских и практических задач</p>	<p>исследовательских и практических задач</p>	<p>при решении исследовательских и практических задач</p>	<p>решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</p>	
<p>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.</p>	<p>Фрагментарные знания особенностей представления результатов научной деятельности в устной и письменной форме</p>	<p>Неполные знания особенностей представления результатов научной деятельности в устной и письменной форме, при работе в российских и международных коллективах</p>	<p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания основных особенностей представления результатов научной деятельности в устной и письменной форме при работе в российских и международных исследовательских коллективах</p>	<p>Сформированные и систематические знания особенностей представления результатов научной деятельности в устной и письменной форме при работе в российских и международных исследовательских коллективах</p>	<p>Индивидуальное собеседование, письменные ответы на вопросы, рейтинг</p>
<p>У1 (УК-3) Уметь следовать нормам, принятым в научном общении при работе в российских и международных исследовательских коллективах с целью решения научных и научно-образовательных</p>	<p>Фрагментарное следование нормам, принятым в научном общении при работе в российских и международных исследовательских коллективах с целью решения научных и научно-образовательных</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое следование нормам, принятым в научном общении при работе в российских и международных исследовательских коллективах с целью решения научных и научно-</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение следовать основным нормам, принятым в научном общении при работе в российских и международных исследовательских коллективах с целью</p>	<p>Успешное и систематическое следование нормам, принятым в научном общении, для успешной работы в российских и международных исследовательских коллективах с целью решения научных и</p>	<p>Индивидуальное собеседование, письменные ответы на вопросы, рейтинг</p>

задач в области физики наноструктур.	задач	образовательных задач	решения научных и научно-образовательных задач	научно-образовательных задач	
<p>В1 (УК-3) Владеть 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.</p>	<p>Фрагментарное применение навыков 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</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое применение навыков 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</p>	<p>В целом успешное, но сопровождающееся отдельными ошибками применение навыков 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</p>	<p>Успешное и систематическое применение навыков 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</p>	<p>Индивидуальное собеседование, письменные ответы на вопросы, рейтинг</p>
<p>31 (УК-5) Знать содержание процесса целеполагания профессионального и личностного развития, его особенности и способы реализации при решении</p>	<p>Допускает существенные ошибки при раскрытии содержания процесса целеполагания, его особенностей и способов реализации.</p>	<p>Демонстрирует частичные знания содержания процесса целеполагания, некоторых особенностей профессионального развития и самореализации личности,</p>	<p>Демонстрирует знания сущности процесса целеполагания, отдельных особенностей процесса и способов его реализации, характеристик профессионального</p>	<p>Раскрывает полное содержание процесса целеполагания, всех его особенностей, аргументированно обосновывает критерии выбора способов профессиональной и</p>	<p>Индивидуальное собеседование, письменные ответы на вопросы, рейтинг</p>

<p>профессиональных задач, исходя из этапов карьерного роста и требований рынка труда в сфере применения физики наноструктур.</p>		<p>указывает способы реализации, но не может обосновать возможность их использования в конкретных ситуациях.</p>	<p>развития личности, но не выделяет критерии выбора способов целереализации при решении профессиональных задач.</p>	<p>личностной целереализации при решении профессиональных задач.</p>	
<p>У1 (УК-5) Уметь 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.</p>	<p>Имея базовые представления о тенденциях развития профессиональной деятельности и этапах профессионального роста, не способен сформулировать цели профессионального и личностного развития.</p>	<p>При формулировке целей профессионального и личностного развития не учитывает тенденции развития сферы профессиональной деятельности и индивидуально-личностные особенности.</p>	<p>Формулирует цели личностного и профессионального развития, исходя из тенденций развития сферы профессиональной деятельности и индивидуально-личностных особенностей, но не полностью учитывает возможные этапы профессиональной социализации.</p>	<p>Готов и умеет формулировать цели личностного и профессионального развития и условия их достижения, исходя из тенденций развития области профессиональной деятельности, этапов профессионального роста, индивидуально-личностных особенностей.</p>	<p>Индивидуальное собеседование, письменные ответы на вопросы, рейтинг</p>
<p>В1 (УК-5) Владеть приемами и технологиями целеполагания, целереализации и оценки результатов деятельности по</p>	<p>Владеет отдельными приемами и технологиями целеполагания, целереализации и оценки результатов</p>	<p>Владеет отдельными приемами и технологиями целеполагания, целереализации и оценки результатов деятельности по</p>	<p>Владеет приемами и технологиями целеполагания, целереализации и оценки результатов деятельности по решению</p>	<p>Демонстрирует владение системой приемов и технологий целеполагания, целереализации и оценки результатов</p>	<p>Индивидуальное собеседование, письменные ответы на вопросы, рейтинг</p>

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

<i>математических моделей, используемых для исследования квантово-механических свойств наноструктур.</i>	<i>использовании соответствующих методик.</i>	<i>соответствующих методик.</i>	<i>соответствующих методик в стандартных ситуациях.</i>	<i>соответствующих методик нестандартных ситуациях.</i>	<i>ответы на вопросы, рейтинг</i>
--	---	---------------------------------	---	---	-----------------------------------

- 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-Шэма для Спин-поляризованной ТФЭП.*
- 7. Опишите основные идеи построения ТФЭП при конечных температурах.*
- 8. Как в рамках ТФЭП 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.*