Программа учебной дисциплины

|  |  |
| --- | --- |
| Название дисциплины | Компьютерное моделирование многоатомных систем |
| Где проводится | Базовая кафедра КТ при ИОФ РАН |
| Автор программы | Павлова Татьяна Витальевна, к.ф.-м.н., доцент ФФ НИУ ВШЭ, с.н.с. ИОФ РАН |
| Курс | 1-ый курс магистратуры |
| Модули | 1-ый и 2-ой модули |
| Объём курса | 1 лекция и 1 семинар (лабораторная работа) в неделю |
| Элементы контроля | 1 презентация, устный экзамен |

# 1. Аннотация дисциплины

Цель семестрового курса – ознакомить студентов с методами расчетов многоатомных систем и сформировать навыки критической оценки научных публикаций, результаты которых получены с использованием квантово-химических расчетов. Число публикаций, в которых используются расчеты, огромно и постоянно растет в различных областях физики, поэтому полученные навыки будут актуальны. В данном курсе моделирование многоатомных систем рассматривается в рамках теории функционала плотности с применением программного пакета VASP. Курс начинается с моделирования систем с минимальным числом атомов – молекул. На примере молекул объясняется, как рассчитать энергию разрыва молекулы, колебания атомов, распределение электронной плотности. Далее рассматриваются твердые тела, которые можно задавать одним или несколькими атомами в элементарной ячейке. Курс заканчивается моделированием молекул на поверхности твердых тел – системой, состоящей из достаточно большого числа различных атомов. Для успешного освоения курса необходимо знание квантовой механики и физики твердого тела.

# 2. Программа дисциплины

# - Область применения квантовых расчетов многоатомных систем. Метод функционала плотности. Схема реализации квантовых расчетов.

# - Лабораторная работа: подключение к серверу и запуск задач. Работа с программой VASP.

# - Моделирование молекул. Оптимизация координат атомов в молекуле. Энергия связи молекулы. Распределение зарядов в молекуле. Колебания молекулы.

# - Моделирование твердых тел. Расчет параметра решетки кристалла. Поверхность кристалла. Молекула на поверхности твердого тела. Расчет плотности электронных состояний.

# - Анализ научной статьи. Представление результатов в форме презентации.

# - Индивидуальный проект. Моделирование структуры на выбор, расчет основных параметров, сравнение с имеющимися данными. Представление результатов в форме презентации.

# 3. Элементы контроля и правила оценивания

Оценки по всем формам контроля выставляются по 10-ти балльной шкале (в случае необходимости применяется арифметическое округление до ближайшего целого).

Текущий контроль предусматривает восемь лабораторных работ, выполняемых в течение 1-го и 2-го модулей. Лабораторная работа состоит из самостоятельного решения задачи в программе VASP и ответов на вопросы.

Итоговый контроль - экзамен в конце 2-го модуля. Проводится устно в формате презентации по индивидуальному проекту и анализу научной статьи.

1. **Накопленная (текущая) оценка Онакоп**рассчитывается как взвешенная сумма оценок за шесть лабораторных работ:
2. Онакоп = (Олр1 + Олр2 + Олр3 + Олр4 + Олр5 + Олр6) / 6
3. где каждая оценка (Олр) выставляется по 10-ти бальной шкале. Способ округления –
4. арифметический.
5. **Итоговая оценка** определяется соотношением
6. Оитоговая = 0,3٠Онакоп + 0,7٠Оэкз,

где Оэкз – оценка за экзамен.

## 4. Примеры заданий элементов контроля

Пример лабораторной работы:

Вычислить энергию адсорбции молекулы галогена на грани (100) металла в программе VASP. Вопросы к лабораторной работе:

- Молекуле галогена выгоднее находиться на поверхности или в вакууме?

- Чему равна энергия, необходимая для разрыва молекулы на поверхности? Сравните

ее с энергией разрыва молекулы в вакууме.

- Чему равна энергия адсорбции молекулы?

Пример устного экзамена:

1. Задача: разобраться в научной публикации, результаты в которой частично или полностью получены методом теории функционала плотности (DFT). Студент выбирает статью из области его научных интересов или любой другой. Студент изучает выбранную статью и делает короткий доклад с презентацией на 10–15 минут.
2. Задача для расчетов выдается каждому студенту отдельно, исходя из его научных интересов, выбранной статьи для доклада и с учетом возможности решения задачи за несколько занятий на небольшом сервере. В течение нескольких занятий студент решает задачу, задает вопросы по задаче преподавателю. Цель — максимально полно использовать полученные в данном практикуме навыки расчета и рассчитать как можно больше характеристик. Проект оформляется студентом в виде презентации и доклада на 10–15 минут.

# 5. Рекомендованная литература и ссылки по теме

## 5.1. Основной список

1. 1. David S. Sholl and Janice A. Steckel. Density functional theory: a practical introduction. John Wiley & Sons, 2009.
2. 2. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. Физматлит, 1988.
3. 3. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Теоретическая физика. Квантовая механика. т.3. М., Наука, 1989.

## 5.2. Дополнительный список

1. 4. Оура К., Лифшиц В.Г., Саранин А.А., Зотов А.В., Катаяма М. Введение в физику поверхности. М.: Наука, 2006.
2. 5. Р. Бейдер. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир, 2001
3. 6. Axel Gross. Theoretical Surface Science. Springer-Verlag, 2009.