Программа учебной дисциплины  
 «Методы математического моделирования многоэлектронных систем»

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 «Методы математического моделирования многоэлектронных систем» являются:

* Знакомство студентов с основными физическими концепциями многоэлектронных систем, используемыми для их моделирования из первых принципов;
* Знакомство студентов с основными математическими методами, применяемыми для моделирования многоэлектронных систем из первых принципов;
* Знакомство студентов с техникой параллельных вычислений и с современными программными пакетами для математического моделирования многоэлектронных систем из первых принципов;
* формирование у студентов профессиональных компетенций, связанных с выполнением параллельных вычислений на мультипроцессорных вычислительных системах и использованием современных программных пакетов для проведения математического моделирования многоэлектронных систем из первых принципов

В результате освоения дисциплины студент должен:

**знать:**

- основные физические концепции, лежащие в основе моделирования многоэлектронных систем из первых принципов;

- основные математические методы, используемые при моделирования многоэлектронных систем из первых принципов;

- современные программные пакеты, используемые для расчётов электронной структуры и фононных спектров твёрдых тел из первых принципов;

**уметь:**

- формулировать задачу моделирования для конкретных физических объектов;

**владеть:**

- навыками задания входных параметров для основных программных макетов, используемых для моделирования, запуска программ на счёт на многопроцессорных вычислительных системах и анализа полученных в результате вычислений данных.

Изучение дисциплины «Методы математического моделирования многоэлектронных систем» 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;

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).

Основные положения дисциплины должны быть использованы в дальнейшем при изучении следующих дисциплин:

Дисциплина не привязана жёстко к другим дисциплинам магистерского цикла, не имеет строгих пререквизитов и не является пререквизитом для других курсов. Для освоения учебной дисциплины студенты должны владеть следующими знаниями и компетенциями:

II. СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

**Раздел 1** Одноэлектронные волновые функции как представления группы трансляций. Теорема Блоха. Квазиимпульс электрона. Зона Бриллюэна. Классификация собственных значений энергии электрона в кристалле. Точки вырождения в зоне Бриллюэна и их связь с точечной симметрией кристалла. Плотность состояний. Особенности Ван Хова и их связь с особыми точками зоны Бриллюэна. Квазичастицы в теории Ферми-жидкости Ландау. Приближение самосогласованного поля. Вариационный метод. Приближения Хартри. и Хартри-Фока. Приближение Борна-Оппенгеймера. Корреляционная энергия. Присоединённые плоские волны. Ортогонализованные плоские волны. Функции Ваннье. Вычисление базисных функций. Функционал плотности электронов. Теоремы Хохенберга-Кона. Функциональные производные. Уравнения Кона-Шэма. Обменное взаимодействие.

**Раздел 2** Корреляционная энергия. Гибридные функционалы. Локальные и нелокальные методы. Приближение локальной плотности (LDA) и обобщённая градиентная аппроксимация (GGA). Функционал Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE).Потенциалы и псевдопотенциалы. Концепция псевдопотенциала. Потенциалы изолированных атомов. Нелокальные псевдопотенциалы, сохраняющие норму волновой функции. Ультрамягкие псевдопотенциалы. Методы вычисления псевдопотенциалов. Движение магнитного момента в электрическом поле. Спектры тяжёлых атомов. Уравнение Дирака в пределе малых скоростей. Уравнение Дирака для сферического потенциала.

**Раздел 3** Многочастичный гамильтониан для частиц со спином. Функционал спиновой плотности. Уравнения Кона-Шэма для частиц со спином. Приближение локальной спиновой плотности. Релятивистские псевдопотенциалы. Функционал плотности в случае магнитного упорядочения. Коллинеарное и неколлинеарное упорядочение. Функционалы плотности для парамагнетиков, ферромагнетиков, антиферромагнетиков и ферримагнетиков. Програмная реализация метода функционала плотности для расчётов. Программные пакеты AbInit, Siesta, Quantum Espresso, VASP Vien2k. Общая структура программы на примере AbInit. Внутреннее представление величин в программе. Входные параметры программы. Описание кристаллической структуры. Выбор точек в зоне Бриллюэна. Гамма-центрированная и Monkhorst Pack сетки к-точек.

**Раздел 4** Програмная реализация метода функционала плотности для расчётов. Выбор псевдопотенциалов. Металлы и диэлектрики: числа заполнения состояний и сглаживание поверхности Ферми. Итерационные методы решения уравнений Кона-Шэма. Сходимость итерационного процесса. Признаки сходимости. Параметры, влияющие на сходимость. Программная реализация метода функционала плотности для расчётов. Реализация параллельных расчётах на многопроцессорных системах. Системы с общей и распределённой памятью. Подготовка программного пакета для работы с использованием MPI, OpenMP и гибридных вычислений. Различные механизмы параллелизации вычислений с функционалом плотности. Входные параметры, обеспечивающие скорость вычислений и стабильность процесса сходимости. Анализ результатов вычислений. Плотность состояний и локальная плотность состояний. Поверхности Ферми. Вычисление энергетических уровней кристаллических структур с поверхностью, дефектами и больших кластеров.

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 такое особенности Ван Хова?
* Построить зависимость энергии электрона слабом периодическом потенциале от его квазиимпульса в одномерном случае?
* Как влияет спин-орбитальное взаимодействие на электронные уровни в тяжёлом атоме?
* В чём различие электронных спектров бесконечной периодической цепочки потенциальных ям и конечного отрезка этой цепочки из N ям?
* Чем отличаются электронные уровни атома водорода в свободном пространстве и атома водорода в кубической потенциальной яме с бесконечно высокими стенками с размерами, много большими радиуса Бора?
* Что такое коррреляционная энергия?
* Какие типы псевдопотенциалов можно использовать для учёта спин-орбитального взаимодействия?

V.  РЕСУРСЫ

Основная литература

# [D. Sholl](https://www.amazon.com/s/ref=dp_byline_sr_book_1?ie=UTF8&field-author=David+Sholl&text=David+Sholl&sort=relevancerank&search-alias=books), [J. A. Steckel](https://www.amazon.com/s/ref=dp_byline_sr_book_2?ie=UTF8&field-author=Janice+A+Steckel&text=Janice+A+Steckel&sort=relevancerank&search-alias=books) Density Functional Theory: A Practical Introduction. Wiley, 2009.

# E. Engel, R.M. Dreizler. Density Functional Theory: An Advanced Course. Sprienger, 2011.

Дополнительная литература

Н. Марч, У. Янг, С. Сампантхар. Проблема многих тел в квантовой механике. М: Мир, 1969.

У. Харрисон. Электронная структура и свойства твёрдых тел М: Мир, 1983

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 ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН* |
| 2. | Microsoft Office Professional Plus 2010 | *Из внутренней сети ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН* |
| 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/ |
|  | 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.

**Many electron system simulation methods**

**Аннотация**

* Учебная дисциплина предполагает знакомство студентов с основными физическими концепциями многоэлектронных систем и основными математическими методами, применяемыми для моделирования многоэлектронных систем из первых принципов, техникой параллельных вычислений, с современными программными пакетами для математического моделирования многоэлектронных систем из первых принципов, а также формирование у студентов профессиональных компетенций, связанных с выполнением параллельных вычислений на мультипроцессорных вычислительных системах и использованием современных программных пакетов для проведения математического моделирования многоэлектронных систем из первых принципов. Результатами освоения дисциплины являются приобретение студентами умения формулировать задачу моделирования для конкретных физических объектов и навыков задания входных параметров для основных программных макетов, используемых для моделирования, запуска программ на счёт на многопроцессорных вычислительных системах и анализа полученных в результате вычислений данных.