**Компьютерные методы моделирования материалов**

указания для самостоятельной работы

Составитель: д.ф.-м.н., профессор Мирзоев А.А.

**ВВЕДЕНИЕ**

Методические указания по самостоятельной работе аспирантов по курсу «Компьютерные методы моделирования материалов» направлена на организацию самостоятельной работы аспиранта и ставят целью помочь аспирантам, изучающим данную дисциплину, в организации наиболее эффективной работы по усвоению всех ее разделов.

Общая трудоемкость дисциплины «Компьютерные методы моделирования материалов» в соответствии с учебным планом по направлению 03.06.01 «Физика и астрономия» составляет 108 часов; трудоемкость самостоятельной работы студентов по данной дисциплине составляет 72 часа. Трудоемкость самостоятельной работы определяется с учетом времени, необходимого для проработки теоретического материала для подготовкик лекционным занятиям и экзамену.

**Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:**

ПК-2.1- умение проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твердом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях.

Целью самостоятельной работы так же, как и при проведении аудиторных занятий, является формирование у студентов комплекса знаний, умений и навыков по дисциплине «Компьютерные методы моделирования материалов». Задачами, реализуемыми в ходе выполнения самостоятельной работы, являются:

-приобретение студентами новых знаний и умений без непосредственного участия в этом процессе преподавателей.

-умение самостоятельной ориентации в научной информации,

-накопление профессиональных знаний и выработка на этой основе соответствующих компетенций.

**СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «Компьютерные методы моделирования материалов»**

В курсе «Компьютерные методы моделирования материалов» аспиранты изучают основы фундаментальных знаний в области физики и методов компьютерного моделирования конденсированных состояний материалов:

**Строение вещества.**

Электронная структура атомов. Химическая связь и ближний порядок. Электронные свойства твердых тел. Основные приближения зонной теории. Суть и границы применимости адиабатического приближения в разделении электронного и ядерного движений в кристалле, самосогласованных методов Хартри и Хартри-Фока, циклических граничных условий Борна-Кармана, изучение общих свойств электронов в периодическом поле, приближения почти свободных электронов и сильной связи, принципов построения поверхности Ферми в металлах, приближения эффективной массы в законе дисперсии.

Математическое описание колебаний решётки с применением нормальных координат и обобщенных импульсов, гармонического приближения, динамической матрицы, связь закона дисперсии колебаний со структурой и размерностью кристаллической решётки, квантование колебаний. Идеи Ландау об элементарных возбуждениях, квазичастицах.

**Теоретические основы первопринципных и полуэмпирических методов моделирования атомной и электронной структуры конденсированных систем.**

Методика применения существующих пакетов компьютерного моделирования (WIEN-2k,SIESTA, LAMMPS) для расчетов структуры, электронных, колебательных и термодинамичсеких характеристик материалов. Теория функционала плотности (ТФП). Методы расчета энергетического спектра электронов в твердых телах. Применение современных пакетов расчета полной энергии кристалла в рамках ТФП для расчета различных характеристик кристаллических и наноструктурных материалов( энергия точечных и плоских дефектов структуры, спектры колебаний решетки, электронные, магнитные и тепловые свойства).

**Методические указания по самостоятельной работе студентов по курсу «Компьютерные методы моделирования материалов».**

Для теоретической проработки отдельных разделов курса дайте развернутые ответы на вопросы:

|  |  |
| --- | --- |
| 1.Строение вещества. Электронная структура атомов и химическая связь. | 1. Каковы основные этапы развития электронной теории кристаллов и наночастиц?2. Дайте классификацию основных типов химической связи. Как они связаны с перекрытием волновых функций атомов?3. Какие материалы называют узкозонными и широкозонными? К какому классу относятся переходные металлы? |
| 2. Основные приближения зонной теории. Суть и границы применимости адиабатического приближения. Метод самосогласованного поля Хартри и Хартри-Фока. | 1.Какие слагаемые содержит полный гамильтониан конденсированного тела? 2.В чем состоит адиабатическое приближение и каков его физический смысл?3.Объясните физический смысл приближения самосогласованного поля? При каких условиях оно справедливо?4.Чем отличаются методы Хартри и Хартри-Фока? Какой метод приводит к более точному описанию самосогласованного поля и почему?5.Корреляции между какими электронами описывает метод Хартри-Фока? Что называется корреляционной дыркой? Почему метод Хартри-Фока предсказывает появление щели на уровне Ферми? Для каких материалов это неприемлемо? |
| 3. Теория функционала плотности. | 1.Сформулируйте теорему Хоэнберга-Кона. Как из этой теоремы вытекает, что энергия системы является функционалом электронной плотности?2. Что называют обменно-корреляционным потенциалом?3. Какова логика вывода уравнения Кона-Шэма?4. В чем состоит физический смысл приближения локальной плотности для вычисления функционала Кона-Шэма?Чем приближение локальной плотности отличается от приближения GGA?5. Какова область применимости теории Кона-Шэма? |
| 4. Общие свойства электронов в периодическом поле кристаллической решетки. Зонная структура электронного спектра. Поверхности Ферми в металлах. | 1. Как связана теорема Блоха с симметрией кристалла?2. Почему для описания кристалла используют периодические граничные условия? К каким следствиям это приводит? Что такое зона Бриллюэна? Сколько электронных состояний содержится в пределах одной зоны Бриллюэна?3.Что такое поверхность Ферми?4. Как производится ее построение? |
|  5. Методы расчета электронного спектра.  | 1. В чем состоит приближение свободных электронов и сильной связи? Для каких материалов эти методы хорошо подходят? 2.Каким методом рассчитывают электронный спектр переходных металлов? Почему?3.Что такое маффин-тин приближение?5. В чем состоит вычислительная привлекательность и возможность использования линеаризованных маффин-тин методов?  |
| 6. Динамика электронов в кристаллах и наночастицах | 1.В чем состоит приближение эффективной массы в законе дисперсии?2. Каковы особенности плотности электронных состояний в одно-, двух- и трехмерных периодических системах?3. Физический смысл баллистического режима проводимости наноконтактов?Объясните отличие сопротивления, описываемого формулой Ландауэра от обычного омического. |

**СПИСОК рекомендуемой ОСНОВНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ**

1.Ашкрофт, Н. Физика твердого тела Т. 1 В 2-х т. Пер. с англ. Михайлова А. С.; Под ред. Каганова М. И. - М.: Мир, 1979. - 399 с. ил.

2.Ашкрофт, Н. Физика твердого тела Т. 2 Пер. с англ.: В 2-х т. Пер. Кугеля К. И., Михайлова А. С.; Под ред. Каганова М. И. - М.: Мир, 1979. - 422 с. ил.

3. Р. Гельчинский, А. А. Мирзоев, А. Г. ВоронцовВычислительные методы микроскопической теории металлических расплавов и нанокластеров.. - М.: Физматлит, 2011. - 196 с. ил.

4. Вонсовский, С. В. Квантовая физика твердого тела. - М.: Наука, 1983. - 336 с. ил.