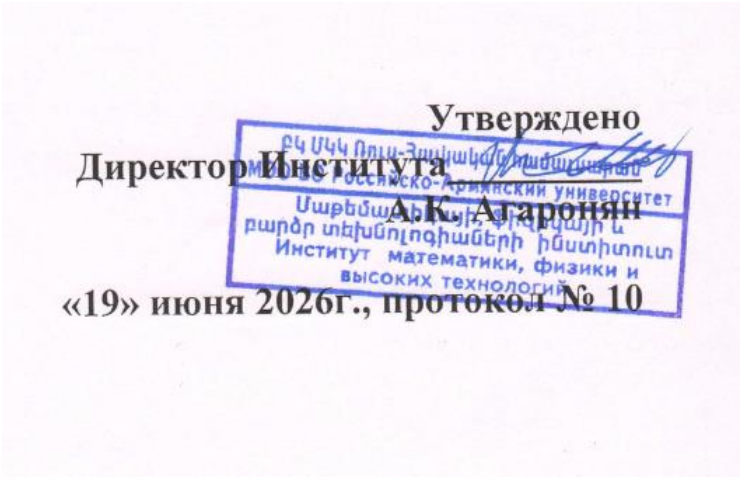
Межгосударственная образовательная организация высшего образования
«Российско-Армянский университет»



Утверждено
Директор Института
А.К. Агаронян
«19» июня 2026г., протокол № 10

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины: Б1.О.19 Теория функционала плотности и методы моделирования квантовых систем

Автор (ы) **к.ф.-м.н., преподаватель Гумарова Ирина Ивановна**
Ф.И.О, ученое звание (при наличии), ученая степень (при наличии)

Направление подготовки: 11.03.04 Электроника и наноэлектроника
Наименование образовательной программы: Квантовая информатика

Согласовано:

Заведующий Кафедрой общей физики и квантовых наноструктур

Айрапетян Д.Б.



(подпись)

1. АННОТАЦИЯ

1.1. Краткое описание содержания данной дисциплины;

Теория функционала плотности одна из самых распространённых для решения уравнения Шредингера для квантовых систем, таких как молекулы, кристаллы, поверхности, двумерных и низкоразмерных материалах. Данный метод может применяется для расчета физических, химических параметров системы, и предсказания новых стабильных материалов. Целью освоения дисциплины «Теория функционала плотности и методы моделирования квантовых систем» является знакомство с фундаментами теории функционала плотности и ее применения для квантовых систем с помощью известными и общедоступными программами.

1.2. Трудоемкость в академических кредитах и часах, формы итогового контроля (экзамен/зачет);

3 академических кредита / 108 часа. Форма итогового контроля — зачет.

1.3. Взаимосвязь дисциплины с другими дисциплинами учебного плана специальности (направления)

"Нанотехнологии", "Квантовая механика" и " Численные методы в физике"

1.4. Результаты освоения программы дисциплины:

Код компетенции *(в соответствии рабочим с учебным планом)*	**Наименование компетенции** *(в соответствии рабочим с учебным планом)*	**Код индикатора достижения компетенций** *(в соответствии рабочим с учебным планом)*	**Наименование индикатора достижений компетенций***(в соответствии рабочим с учебным планом)*
ПК-2	Способен разрабатывать эффективные алгоритмы решения сформулированных задач с использованием современных языков программирования и обеспечивать их программную реализацию	ПК-2.1 ПК-2.2	Знает методы разработки эффективных алгоритмов решения научно-исследовательских задачц Умеет использовать алгоритмы решения

		ПК-2.3	исследовательских задач с использованием современных языков программированияц Владеет навыками разработки стратегии и методологии исследования изделий микро- и наноэлектроники

2. УЧЕБНАЯ ПРОГРАММА

2.1. Цели и задачи дисциплины

Целью освоения дисциплины «Теория функционала плотности и методы моделирования квантовых систем» является:

- Изучения основ моделирования квантовых систем
- Изучения теории функционала плотности
- Развития навыков использования специальнух програм для расчета с теориея функционала плотности.

2.2. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы (в академических часах и зачетных единицах) ***(удалить строки, которые не будут применены в рамках дисциплины)***

Виды учебной работы	**Всего, в акад. часах**	**Распределение по семестрам**
		1 сем
1	**2**	**3**
1. Общая трудоемкость изучения дисциплины по семестрам, в т. ч.:	**108**	**108**
1.1. Аудиторные занятия, в т. ч.:	**64**	**64**
1.1.1. Лекции	**32**	**32**
1.1.2. Практические занятия, в т. ч.	**32**	**32**
1.1.3. Лабораторные работы	**-**	**-**
1.2. Самостоятельная работа, в т. ч.:	**44**	**44**

1.3. Консультации		
Итоговый контроль (Экзамен, Зачет, диф. зачет - указать)	**Зачет**	

2.3. Содержание дисциплины

2.3.1. Тематический план и трудоемкость аудиторных занятий (модули, разделы дисциплины и виды занятий) по рабочему учебному плану

Разделы и темы дисциплины	**Всего (ак. часов)**	**Лекции (ак. часов)**	**Практ. Занятия (ак. часов)**
1	**2=3+4+5+6+7**	**3**	**4**
Тема 1. Введения в моделирование	**4**	**2**	**2**
Тема .2. Операционная система Linux	**8**	**4**	**4**
Тема 3. Парные потенциалы	**4**	**2**	**2**
Тема 4. Многочастичная задача	**4**	**2**	**2**
Тема 5. Основы теории дфт	**4**	**2**	**2**
Тема 6. ДФТ в практике	**8**	**4**	**4**
Тема 7. Моделирования кристаллов	**4**	**2**	**2**
Тема 8 . Моделирования поверхностей	**8**	**4**	**4**
Тема 9. Использование Python-а моделировании	**8**	**4**	**4**
Тема 10. Моделирования фононов	**4**	**2**	**2**

Тема 11. Молекулярная динамика	**4**	**2**	**2**
ИТОГО	**64**	**32**	**32**

2.3.2. Краткое содержание разделов дисциплины в виде тематического плана

Тема 1. Введение в моделирование
Моделирование позволяет изучать физические системы с помощью математических и компьютерных методов. В этой лекции рассматриваются основные подходы к моделированию, их преимущества и ограничения.

Тема 2. Операционная система Linux
Linux – это мощная и гибкая среда для научных расчетов и моделирования. Лекция охватывает основы работы в терминале, управление файлами и пакетами, а также принципы работы с удаленными серверами.

Тема 3. Парные потенциалы
Парные потенциалы описывают взаимодействие между атомами и молекулами в системах конденсированных сред. Будут рассмотрены основные типы потенциалов (Леннард-Джонса, Морзе и др.) и их применение в расчетах.

Тема 4. Многочастичная задача
В сложных физических системах взаимодействуют многие частицы, что требует специальных методов моделирования. Лекция посвящена методам решения многочастичной задачи, включая методы Хартри-Фока.

Тема 5. Основы теории DFT
В лекции рассматриваются базовые принципы DFT теоремы Кона и Хоэнберга, Кона и Шама, включая аппроксимации LDA и GGA.

Тема 6. DFT на практике
Лекция посвящена практическому использованию DFT для расчета электронных структур и свойств материалов. Рассматриваются программные пакеты Quantum ESPRESSO и их настройка.

Тема 7. Моделирование кристаллов
Кристаллические материалы обладают периодической структурой, что упрощает их моделирование. В лекции рассматриваются базовые методы моделирования кристаллов, включая использование симметрии и базисных ячеек.

Тема 8. Моделирование поверхностей
Поверхности материалов имеют уникальные свойства, важные для катализа и нанотехнологий. Лекция охватывает методы построения моделей поверхностей и их изучения с помощью DFT.

Тема 9. Использование Python в моделировании
Python — удобный язык для численного моделирования благодаря библиотекам NumPy,

SciPy и ASE. В лекции рассматриваются примеры использования Python для работы с атомными системами и анализа данных.

Тема 10. Моделирование фононов
Фононы описывают колебания атомов в твердом теле и влияют на теплопроводность и электронные свойства. Лекция посвящена расчету фононных спектров с помощью методов DFT и модели гармонических колебаний.

Тема 11. Молекулярная динамика
Молекулярная динамика позволяет моделировать эволюцию атомных систем во времени на основе законов классической механики. В лекции рассматриваются алгоритмы интегрирования уравнений движения и выбор силовых полей.

2.3.3. Краткое содержание семинарских/практических занятий/лабораторного практикума

Во время практических занятий студенты применяют знания, полученные во время лекций. Практические занятия в основном будут проводиться путем решения соответствующих задач в компьютерной аудитории. Некоторые темы/примеры будут продемонстрированы соответствующими примерами/моделями с помощью проектора.

2.3.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для эффективной организации проработок нужна компьютерная аудитория с проектором.

2.4. Модульная структура дисциплины с распределением весов по формам контролей

Формы контролей	**Вес формы (форм) текущего контроля в результирующей оценке текущего контроля (по модулям)**		**Вес формы промежуточного контроля в итоговой оценке промежуточного контроля**		**Вес итоговой оценки промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей**		**Вес итоговой оценки промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей (семестровой оценке)**	**Веса результирующей оценки промежуточных контролей и оценки итогового контроля в результирующей оценке итогового контроля**
Вид учебной работы/контроля	**М1**[1]	**М2**	**М1**	**М2**	**М1**	**М2**		
Контрольная работа *(при наличии)*			0.5	0.5				
Устный опрос *(при наличии)*								
Лабораторные работы *(при наличии)*	0.5	0.5						
Письменные домашние задания *(при наличии)*								
Решение задач	0.5	0.5						

[1] Учебный Модуль

Веса результирующих оценок текущих контролей в итоговых оценках промежуточных контролей					0.5	0.5		
Веса оценок промежуточных контролей в итоговых оценках промежуточных контролей								
Вес итоговой оценки 1-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей							0.5	
Вес итоговой оценки 2-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей							0.5	
Вес результирующей оценки промежуточных контролей в результирующей оценке итогового контроля								0.5
Вес итогового контроля (Экзамен/зачет) в результирующей оценке итогового контроля								0.5
	∑ = 1	**∑ = 1**	**∑ = 1**	**∑ = 1**	**∑ = 1**	**∑ = 1**	**∑ = 1**	**∑ = 1**

3. **Теоретический блок** ***(указываются материалы, необходимые для освоения учебной программы дисциплины)***

3.1. Материалы по теоретической части курса

3.1.1. Учебник(и);

- Introduction to computational chemistry, Frank Jensen, 1998
- Essentials of computational chemistry theories and models, Christopher J. Cramer, 2002
- Density functional theory, a practical introduction, David S. Sholl and Janice A. Steckel, 2009
- Materials Modelling using Density Functional Theory, Feliciano Giustino, 2014

4. **Фонды оценочных средств** ***(указываются материалы, необходимые для проверки уровня знаний в соответствии с содержанием учебной программы дисциплины).***

4.1. Планы практических и семинарских занятий

Установка программного обеспечения и знакомство с интерфейсом

- Установка Quantum ESPRESSO / ORCA / VASP / Gaussian
- Работа с входными и выходными файлами

Расчет электронной плотности простых атомов и молекул (H, He, H_2)

- Настройка расчетов
- Визуализация электронной плотности

Сравнение функционалов (LDA, GGA) на примере молекулы H_2O

- Анализ энергии и структуры
- Интерпретация результатов

Оптимизация геометрии молекул (NH_3, CO_2)

- Вычисление сил
- Критерии сходимости

Расчет структуры кристаллического кремния с периодическими условиями

- Подбор псевдопотенциала
- Определение решеточной постоянной

SCF-процедура: сходимость и выбор параметров

- Влияние параметров SCF (cutoff, mix, smearing)
- Поведение энергии на итерациях

Вакуумные условия при моделировании изолированных молекул и кластеров

- Расчет изолированной молекулы в ячейке
- Подбор размеров вакуума

Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь в димере воды

- Расчет энергии связи
- Сравнение с литературными данными

Расчет плотности состояний (DOS) и зонной структуры (Si, графен)

- Построение DOS
- Интерпретация зонных диаграмм

Распределение заряда: анализ Mulliken и Löwdin

- Расчет на молекуле формальдегида
- Сравнение методов

Моделирование оптических свойств: УФ-спектр молекулы бензола

- Расчет поглощения
- Построение спектра

Вибрационные спектры: расчет ИК-спектра молекулы воды

- Вычисление частот
- Идентификация активных мод

Расчет энергии связи и барьеров реакции (на примере H_2)

- Введение в NEB
- Энергия диссоциации

Расчет возбужденных состояний методом TDDFT (формальдегид)

- Определение уровней возбуждения
- Расчет флуоресцентного спектра

Индивидуальные проекты: моделирование молекулы или материала

- Подготовка расчетов
- Представление результатов

4.2. Вопросы и задания для самостоятельной работы студентов

- ✓ Сформулируйте основные постулаты теории функционала плотности.
- ✓ В чем заключается физический смысл уравнений Кона–Шэма?
- ✓ Сравните приближения LDA, GGA и гибридных функционалов.
- ✓ Что такое псевдопотенциал и зачем он используется в DFT-расчетах?
- ✓ Объясните понятие самосогласованного поля (SCF) и критерии его сходимости.
- ✓ Какие граничные условия применяются при моделировании кристаллов и молекул?
- ✓ Чем отличается одночастичная энергия от полной энергии системы?
- ✓ Как рассчитываются оптические свойства в рамках DFT?
- ✓ Как интерпретировать плотность состояний (DOS) и зонную диаграмму?
- ✓ Объясните различия между методами Mulliken, Löwdin и Bader при анализе распределения заряда.
- ✓ В чем особенности моделирования возбужденных состояний и как применяется TDDFT?
- ✓ Как проводится расчет вибрационных спектров в рамках DFT?

4.3. Образцы вариантов контрольных работ, тестов и/или других форм текущих и промежуточных контролей

- ✓ Провести расчет энергии и оптимизации геометрии молекулы CO_2 с использованием двух разных функционалов (LDA и GGA). Сравнить результаты.
- ✓ Выполнить расчет плотности состояний (DOS) для кристаллического кремния. Построить график и охарактеризовать ширину запрещенной зоны.
- ✓ Определить частоты колебаний молекулы H_2O и указать, какие из них активны в ИК-спектре.
- ✓ Смоделировать водородную связь в димере воды и рассчитать энергию взаимодействия.
- ✓ Провести анализ Mulliken и Löwdin для молекулы аммиака и сравнить распределение электронного заряда.
- ✓ Рассчитать УФ-спектр бензола методом TDDFT и определить основные полосы поглощения.
- ✓ Подготовить отчет о сравнении SCF-сходимости при разных параметрах (cutoff, mixing, smearing) для молекулы CH_4.
- ✓ Построить модель поверхности Si(100) и рассчитать плотность электронного состояния для неё.

- ✓ Смоделировать реакционный путь для диссоциации H_2 и рассчитать энергетический барьер.
- ✓ Разработать собственный расчетный проект (молекула или материал по выбору) и представить краткий письменный отчет с результатами.

4.4. Перечень экзаменационных вопросов

1. Сформулируйте основные постулаты теории функционала плотности (DFT).
2. Объясните теорему Хоэнберга–Кона и её значение для DFT.
3. Выведите уравнения Кона–Шэма и объясните физический смысл каждого слагаемого.
4. Что такое функционал обменно-корреляционной энергии? Примеры LDA, GGA, гибридных функционалов.
5. Поясните, в чём заключается метод самосогласованного поля (SCF) в DFT-расчётах.
6. Что такое псевдопотенциал и какие его основные типы? Зачем он используется?
7. Объясните разницу между моделированием молекул и кристаллов в DFT. Какие граничные условия применяются?
8. Что такое плотность электронных состояний (DOS)? Как она рассчитывается и интерпретируется?
9. Расскажите о способах анализа распределения электронного заряда (Mulliken, Löwdin, Bader).
10. Опишите метод оптимизации геометрии в DFT. Какие критерии сходимости используются?
11. В чём особенности расчёта оптических свойств (поглощения, флуоресценции) в рамках DFT?
12. Что такое TDDFT? В каких случаях применяется и какие возможности предоставляет?
13. Объясните, как рассчитываются вибрационные спектры молекул в рамках DFT.
14. Что такое NEB (Nudged Elastic Band) метод и как он используется для поиска переходных состояний?
15. В чём заключаются отличия между одночастичными и возбуждёнными состояниями системы в DFT?

4.5. Образцы экзаменационных билетов

МОО ВО РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ, ФИЗИКИ И ВЫСОКИХ ТЕХНОЛОГИЙ
Кафедра общей физики и квантовых наноструктур

Направление: Электроника и наноэлектроника
Дисциплина: Теория функционала плотности и методы моделирования квантовых систем
(бакалавриат IV-ый курс, I-ый семестр)

Экзаменационный билет № **

1. Что такое псевдопотенциал и какие его основные типы? Зачем он используется?
2. Что такое плотность электронных состояний (DOS)? Как она рассчитывается и интерпретируется?
3. В чём заключаются отличия между одночастичными и возбуждёнными состояниями системы в DFT?

Зав. кафедройОФКН _____Д.Б. Айрапетян
20__г.