

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Директор по образовательной
деятельности

С.Т. Князев



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1149576	Физические свойства сильнокоррелированных систем

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Математическая физика и математическое моделирование	Код ОП 1. 03.04.01/33.01
Направление подготовки 1. Прикладные математика и физика	Код направления и уровня подготовки 1. 03.04.01

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико-математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

Согласовано:

Управление образовательных программ

 Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ **Физические свойства сильнокоррелированных систем**

1.1. Аннотация содержания модуля

Целью модуля является углубленное изучение описания и моделирования свойств важных для практики систем с сильными электронными корреляциями. Одноименная дисциплина служит введением в физику сильнокоррелированных систем. Рассматривается общая проблематика и вычислительные методы теории многочастичных систем с сильными электронными корреляциями. Подробно изучается метод вторичного квантования, приближение среднего поля, метод Томаса-Ферми, метод Хартри-Фока. Детально изучаются методы расчета электронной структуры материалов, в т.ч. теория функционала плотности, уравнения Кона-Шема и связанные с ними вопросы. Много места уделяется различным аспектам численного моделирования физических свойств и процессов в электронных системах.

1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Физические свойства сильнокоррелированных систем	3
ИТОГО по модулю:		3

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	Не предусмотрены
Постреквизиты и кореквизиты модуля	Не предусмотрены

1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Физические свойства сильнокоррелированных систем	УК-1 - Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать	З-2 - Определять этапы разработки стратегии действий, в том числе в цифровой среде, и методы решения проблемных ситуаций У-2 - Обосновывать выбор стратегии для достижения поставленной цели, в том числе

	<p>стратегию действий, в том числе в цифровой среде</p>	<p>в цифровой среде, с учетом ограничений, рисков и моделируемых результатов</p> <p>П-1 - Использовать эффективные стратегии действий для решения проблемной ситуации, в том числе в цифровой среде, с учетом оценки ограничений, рисков и моделируемых результатов</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические способности и критическое мышление</p>
	<p>УК-2 - Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла</p>	<p>З-2 - Формулировать основные принципы формирования концепции проекта в сфере профессиональной деятельности</p> <p>У-2 - Прогнозировать ожидаемые результаты и возможные сферы их применения в зависимости от типа проекта</p> <p>У-3 - Анализировать и оценивать риски и результаты проекта на каждом этапе его реализации и корректировать проект в соответствии с критериями, ресурсами и ограничениями</p> <p>П-2 - Выбирать оптимальные способы решения конкретных задач проекта на каждом этапе его реализации на основе анализа и оценки рисков и их последствий с учетом ресурсов и ограничений</p> <p>Д-2 - Демонстрировать способность убеждать, аргументировать свою позицию</p>
	<p>ОПК-1 - Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях</p> <p>У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях,</p>

		<p>опираясь на фундаментальные законы и принципы с использованием соответствующих целей подходов и методов</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p>
	<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области</p> <p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p>
	<p>ОПК-5 - Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде докладов на российских и международных конференциях</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание правил оформления различных видов и способов представления результатов: научных и научно-технических отчетов, презентаций, публикаций (докладов, статей, тезисов к конференциям, обзоров), стилей и норм научного письма на русском и английском языках</p> <p>З-2 - Соотносить правила проведения профессиональных дискуссий с их характером, и демонстрировать понимание особенностей научных дискуссий</p> <p>У-1 - Оценивать выполненные отчеты, презентации, научные публикации (доклады, статьи, тезисы к конференциям, обзоры) на соответствие нормам научного письма на русском и английском языках</p> <p>У-2 - Сформулировать аргументы для защиты результатов профессиональной деятельности в публичном пространстве</p> <p>П-1 - Иметь опыт подготовки и оформления отчетов, презентаций, научных публикаций (докладов, статей, тезисов к конференциям, обзоров) по результатам деятельности в</p>

		<p>соответствии с правилами и нормами письма на русском и английском языках</p> <p>П-2 - Иметь опыт подготовки выступлений и ведения профессиональных дискуссий, выступлений на семинарах и/или конференциях</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять внимательность и ответственность в подготовке материалов научных исследований к публичному доступу</p>
	<p>ПК-1 - Способен самостоятельно осваивать и применять современные математические методы исследования, анализа и обработки данных, компьютерные программы, средства разработки, научно-исследовательскую, измерительно-аналитическую и технологическую аппаратуру (в соответствии с избранным направлением прикладных математики и физики)</p>	<p>З-1 - Сделать обзор существующих методов и подходов к решению научных проблем в области проводимых исследований</p> <p>У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в области проводимых исследований</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях с использованием соответствующих целям подходов и методов</p>
	<p>ПК-4 - Способен выбирать цели своей профессиональной деятельности и пути их достижения, осуществлять научный, технический, технологический и инновационный поиск, прогнозировать научные, производственные, технологические и социально-экономические последствия</p>	<p>З-1 - Определять цели профессиональной деятельности и пути их достижения, осуществлять научный, технический, технологический и инновационный поиск</p> <p>У-1 - Выбирать и использовать современные IT-технологии и базы данных при сборе, анализе, обработке и представлении информации для решения задач профессиональной деятельности</p> <p>П-1 - Иметь опыт сбора, анализа и обработки информации при решении задач профессиональной деятельности с использованием современных</p>

		информационно-коммуникационных технологий и баз данных
--	--	--

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Физические свойства
сильнокоррелированных систем

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико- математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Мазуренко Владимир Гаврилович, Профессор, теоретической физики и прикладной математики

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Сильнокоррелированные системы в физике и технологии	Подсистемы в твердом теле. Вырожденный электронный газ. Кулоновская и обменная энергия. Энергия корреляции. Многообразие сильнокоррелированных систем. Физико-химические свойства
P2	Методы вторичного квантования в физике многочастичных систем	Многочастичные волновые функции. Свойства симметрии. Базис одночастичных состояний. Числа заполнения. Тожественные частицы и постулат симметризации состояний. Определитель Слэтера. Операторы рождения и уничтожения. Запись одно- и двухчастичных операторов в представлении вторичного квантования. Полевые операторы
P3	Методы расчета зонной структуры	Энергетический спектр электронов в атоме и в кристалле. Энергетические зоны. Особенности зонной структуры изоляторов и металлов. Метод квазисвободных электронов. Особенности спектра вблизи границы зоны Бриллюэна. Метод сильной связи. Эффективная масса зонного электрона. Метод ортогонализированных плоских волн. Псевдопотенциал. Метод присоединенных плоских волн.
P4	Приближение среднего поля и метод Хартри-Фока	Общие принципы приближения среднего поля. Вариационные оценки для энергии системы. Самосогласованное поле. Функциональные производные. Метод молекулярного поля Вейсса в теории магнетизма. Система взаимодействующих электронов. Метод Хартри и Хартри-Фока. Кулоновская и обменная энергия. Обменно-корреляционная дырка. Решение

		уравнений Хартри-Фока и энергия электронного газа в модели желе.
P5	Теория функционала плотности.	Приближение Томаса-Ферми в многоэлектронных задачах. Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционный потенциал. Варианты выбора V_{xc} . Приближение локальной плотности. Возможности и ограничения метода функционала плотности. Расчеты колебательных спектров. Вычисление скоростей химических реакций. Фазовые диаграммы термодинамических систем. Электронная структура и магнитные свойства. Молекулярная динамика.

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
			-	-

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Физические свойства сильнокоррелированных систем

Электронные ресурсы (издания)

1. Изюмов, Ю. А.; Электронная структура соединений с сильными корреляциями : монография.; НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Москва|Ижевск; 2009; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=467651> (Электронное издание)

Печатные издания

- Брандт, Н. Б., Чудинов, С. М.; Электронная структура металлов : Учеб. пособие для физ. специальностей вузов.; Московский университет, Москва; 1973 (20 экз.)
- Кикоин, К. А.; Электронные свойства примесей переходных металлов в полупроводниках; Энергоатомиздат, Москва; 1991 (1 экз.)
- , Немошкаленко, В. В.; Методы вычислительной физики в теории твердого тела: электронная структура идеальных и дефектных кристаллов; Наукова думка, Киев; 1991 (2 экз.)
- Кашурников, В. А., Красавин, А. В.; Численные методы квантовой статистики; ФИЗМАТЛИТ, Москва; 2010 (2 экз.)
- Кашурников, В. А.; Численные методы квантовой статистики; ФИЗМАТЛИТ, Москва; 2010 (1 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

www.elibrary.ru

www.iop.org

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

www.springer.com

www.wiley.com

journals.ioffe.ru

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Физические свойства сильнокоррелированных систем

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Mathematica 6.0.1 Educational Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	VASP 5.2 Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM