

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 |
|------------|--|
| 1142725 | Актуальные проблемы теоретической физики |

Екатеринбург

| Перечень сведений о рабочей программе модуля | Учетные данные |
|---|---|
| Образовательная программа 1. Физика | Код ОП 1. 03.04.02/33.01 |
| Направление подготовки 1. Физика | Код направления и уровня подготовки 1. 03.04.02 |

Программа модуля составлена авторами:

| № п/п | Фамилия Имя Отчество | Ученая степень, ученое звание | Должность | Подразделение |
|--------------|--------------------------------|---|------------------|---------------------------------------|
| 1 | Игошев Петр Алексеевич | кандидат физико-математических наук, без ученого звания | Доцент | теоретической и математической физики |
| 2 | Москвин Александр Сергеевич | доктор физико-математических наук, профессор | Профессор | теоретической и математической физики |
| 3 | Овчинников Александр Сергеевич | доктор физико-математических наук, доцент | Профессор | теоретической и математической физики |

Согласовано:

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Актуальные проблемы теоретической физики

1.1. Аннотация содержания модуля

В модуль входят 3 дисциплины. Курс «Компьютерное моделирование свойств кристаллов» рассматривает современные методы исследования физических свойств и явлений. В рамках курса рассматриваются некоторые типы задач, встречающиеся в физике конденсированного состояния, которые могут быть решены средствами C/C++, MATLAB и Wolfram Mathematica, и позволяют сформировать представления о возможностях использования компьютерного моделирования в физике. Курс «Методы теоретической физики в естественных науках» включает изложение разделов теоретической и математической физики, широко используемых как в физике, так и в смежных разделах естественных наук – химии и биологии. Эти разделы включают метод Монте-Карло, различные теоретические методы моделирования атомно-молекулярных систем, в частности метод молекулярной динамики, элементы термодинамического описания твердых тел и фазовых переходов, псевдоспиновые модели, элементы нелинейной и стохастической динамики, элементы теории стохастических дифференциальных уравнений, теория броуновского движения, уравнение Ланжевена, теория Крамерса. Курс «Электронные свойства сильнокоррелированных систем» знакомит с наиболее актуальными вопросами физики и теории сильнокоррелированных систем, являющихся основными материалами для современной электроники. В курсе рассматриваются основные вопросы современной теории сильнокоррелированных систем на основе соединений переходных элементов группы железа и редких земель. Излагаются основные положения теории многоэлектронных атомов в кристаллах и их взаимодействий, стандартных моделей, основные методы теоретического исследования сильнокоррелированных систем – магнетиков, сверхпроводников, мультиферроиков, низкоразмерных систем.

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 | Компьютерное моделирование свойств кристаллов | 3 |
| 2 | Методы теоретической физики в естественных науках | 3 |
| 3 | Электронные свойства сильно коррелированных систем | 3 |
| ИТОГО по модулю: | | 9 |

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 |
| Компьютерное моделирование свойств кристаллов | 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>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>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> |
| | ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты | <p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов</p> <p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p> <p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> |
| | ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в | З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области |

| | | |
|--|--|--|
| | <p>профессиональной области</p> | <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p> |
| | <p>ПК-2 - Способен применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований</p> | <p>З-1 - Демонстрировать понимание научных проблем по тематике проводимых исследований и разработок</p> <p>У-1 - Обобщать результаты научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ</p> <p>П-1 - Анализировать и систематизировать научные данные, результаты экспериментов и наблюдений</p> |
| <p>Методы теоретической физики в естественных науках</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>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> |
| | <p>ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты</p> | <p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов</p> <p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</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>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p> |
| | <p>ПК-2 - Способен применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований</p> | <p>З-1 - Демонстрировать понимание научных проблем по тематике проводимых исследований и разработок</p> <p>У-1 - Обобщать результаты научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ</p> <p>П-1 - Анализировать и систематизировать научные данные, результаты экспериментов и наблюдений</p> |
| <p>Электронные свойства сильно коррелированных систем</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>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> |
| | <p>ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные</p> | <p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов</p> <p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать</p> |

| | | |
|--|--|---|
| | реальные или модельные эксперименты | <p>необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p> <p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> |
| | ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области | <p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p> |
| | ПК-2 - Способен применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований | <p>З-1 - Демонстрировать понимание научных проблем по тематике проводимых исследований и разработок</p> <p>У-1 - Обобщать результаты научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ</p> <p>П-1 - Анализировать и систематизировать научные данные, результаты экспериментов и наблюдений</p> |

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Компьютерное моделирование свойств
кристаллов

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

| № п/п | Фамилия Имя Отчество | Ученая степень, ученое звание | Должность | Подразделение |
|--------------|--------------------------------|---|------------------|---------------------------------------|
| 1 | Игошев Петр Алексеевич | кандидат физико-математических наук, без ученого звания | Доцент | теоретической и математической физики |
| 2 | Москвин Александр Сергеевич | доктор физико-математических наук, профессор | Профессор | теоретической и математической физики |
| 3 | Овчинников Александр Сергеевич | доктор физико-математических наук, доцент | Профессор | теоретической и математической физики |

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 1 от 18.01.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Игошев Петр Алексеевич, Доцент, теоретической и математической физики
- Москвин Александр Сергеевич, Профессор, теоретической и математической физики
- Овчинников Александр Сергеевич, Профессор, теоретической и математической физики

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 | Введение. Элементы теории кристаллического состояния | Классификация твердых тел. Кристаллическая решетка. Номенклатура кристаллов. Обратная решетка. Зона Бриллюэна. Акустические и оптические фононы. Простейшие модели в теории твердого тела. Потенциалы межатомного взаимодействия. Модель атомов, связанных центральными силами (модель Борна). Модель ионного кристалла (точечные ионы). Модель «желе» для простых металлов. Оболочечная модель кристалла. Электронная подсистема. Орбитальные и спиновые степени свободы. Общий вид гамильтониана системы электронов и ядер. Орбитальное и спиновое упорядочение. Параметры порядка. Теория фазовых переходов Ландау. Обобщенные восприимчивости. Атомы в кристаллах. Элементы теории кристаллического поля. Метод функционала электронной плотности. Приближение локальной плотности (LDA). Спин-гамильтонианы. Спиновые волны, магноны. |
| P2 | Полуэмпирические методы расчета кристаллов | Метод молекулярной динамики. Метод межатомных потенциалов. Оболочечная модель. Комплекс GULP [General Utility Lattice Program, J. Gale, 1997] - наиболее мощная программа для расчетов методом межатомных потенциалов. |
| P3 | Компьютерное моделирование электронной | Использование пакета Wolfram Mathematica для расчета штарковского расщепления и волновых функций 3d- и 4f- |

| | | |
|-----------|--|--|
| | структуры атомов в кристаллах | атомов в кристаллах с различной точечной симметрией. Расчеты теплоемкости, парамагнитной восприимчивости. |
| P4 | Моделирование спектров магнитного резонанса | Основные понятия теории магнитного резонанса (ЭПР, ЯМР, ЯКР, эффект Мёссбауэра). Особенности моделирования спектров магнитного резонанса монокристаллов, поликристаллов, неоднородных спиновых структур. Примеры. |
| P5 | Метод Монте-Карло | Понятие о выборке, конфигурационном пространстве и вероятности конфигурации. Расчет средних методом Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса. Генерирование гауссовского распределения с помощью алгоритма Метрополиса. Условие детального баланса. Оценки ошибок в методе Монте-Карло. Двумерная модель Изинга. Численное моделирование фазового перехода ферромагнетик-парамагнетик. Расчет температурного поведения энергии основного состояния и намагниченности. Расходимость теплоемкости и восприимчивости в точке фазового перехода. Кластерные модификации метода Монте-Карло. |
| P6 | Моделирование спиновых и псевдоспиновых систем | Моделирование структуры основного состояния и фазовых переходов в низкоразмерном магнетике. Моделирование структуры основного состояния и фазовых переходов в низкоразмерной псевдоспиновой системе типа локальных бозонов или ультра-холодных атомов в оптической решетке. |
| P7 | Моделирование зонной структуры кристаллов | Моделирование закона дисперсии и плотности состояний фононов и магнонов. Моделирование электронной зонной структуры. Стандартные пакеты для расчета электронной структуры. |

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерное моделирование свойств кристаллов

Электронные ресурсы (издания)

1. Москвин, А. С.; Атомы в кристаллах : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2018; <http://www.iprbookshop.ru/107024.html> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Москвин, А. С.; Атомы в кристаллах : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2018 (10 экз.)

2. , Овчинников, А. С., Сеницын, В. Е.; Компьютерное моделирование в физике : учебно-методическое пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2011 (20 экз.)
3. Гулд, Х., Полюдов, А. Н., Панченко, В. А.; Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 1. ; Мир, Москва; 1990 (5 экз.)
4. Гулд, Х., Полюдов, А. Н., Панченко, В. А.; Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 2. ; Мир, Москва; 1990 (5 экз.)
5. Кунин, С. Е., Стивен Е., Баркалов, А. Д., Явохин, А. Н., Матвеев, А. Н.; Вычислительная физика; Мир, Москва; 1992 (3 экз.)
6. Тарасевич, Ю. Ю.; Математическое и компьютерное моделирование : Вводный курс : Учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности 030100 - информатика.; УРСС, Москва; 2003 (2 экз.)
7. Тарасевич, Ю. Ю.; Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс : учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности 030100 - Информатика.; УРСС, Москва; 2004 (1 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. American Institute of Physics <http://scitation.aip.org/>
2. American Physical Society <https://journals.aps.org/about>
3. Applied Science & Technology Source EBSCO publishing <http://search.ebscohost.com>
4. INSPEC EBSCO publishing <http://search.ebscohost.com/>
5. Institute of Physics (IOP) <http://iopscience.iop.org/>
6. Университетская библиотека онлайн: <http://biblioclub.ru>
7. Электронная научная библиотека <https://elibrary.ru>
8. Зональная научная библиотека УрФУ. URL: <http://lib.urfu.ru>

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

1. Российская государственная библиотека. URL: <http://www.rsl.ru>
2. Государственная публичная научно-техническая библиотека России. URL: <http://www.gpntb.ru>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерное моделирование свойств кристаллов

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

| № п/п | Виды занятий | Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы | Перечень лицензионного программного обеспечения |
|-------|---|---|--|
| 1 | Лекции | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Подключение к сети Интернет | Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 2 | Практические занятия | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Подключение к сети Интернет | Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 3 | Консультации | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Не требуется |
| 4 | Текущий контроль и промежуточная аттестация | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Не требуется |
| 5 | Самостоятельная работа студентов | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Подключение к сети Интернет | Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Методы теоретической физики в
естественных науках

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

| № п/п | Фамилия Имя Отчество | Ученая степень, ученое звание | Должность | Подразделение |
|--------------|--------------------------------|---|------------------|---|
| 1 | Москвин Александр Сергеевич | доктор физико- математических наук, профессор | Профессор | теоретической и математической физики |

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 1 от 18.01.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Москвин Александр Сергеевич, Профессор, теоретической и математической физики

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 | Метод Монте-Карло | Понятие о выборке, конфигурационном пространстве и вероятности конфигурации. Расчет средних методом Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса. Генерирование гауссовского распределения с помощью алгоритма Метрополиса. Условие детального баланса. Оценки ошибок в методе Монте-Карло. Двумерная модель Изинга. Численное моделирование фазового перехода ферромагнетик-парамагнетик. Расчет температурного поведения энергии основного состояния и намагниченности. Расходимость теплоемкости и восприимчивости в точке фазового перехода. Кластерные модификации метода Монте-Карло. Основные представления квантового метода Монте-Карло. Примеры монте-карловских расчетов. |
| P2 | Теоретические методы моделирования атомно-молекулярных систем | Методы молекулярной динамики. Методы классической молекулярной динамики. Межатомные короткодействующие потенциалы. Методы расчета дальнедействующего электростатического взаимодействия. Оболочечная модель. Комплекс GULP [General Utility Lattice Program, J. Gale, 1997] - наиболее мощная программа для расчетов методом межатомных потенциалов. Квантовые методы молекулярной динамики. Особенности моделирования биомолекул. Использование пакета Wolfram Mathematica для расчета штарковского расщепления и волновых функций 3d- и 4f- |

| | | |
|-----------|---|--|
| | | <p>атомов в кристаллах с различной точечной симметрией. Расчеты теплоемкости, парамагнитной восприимчивости.</p> <p>Основные понятия теории магнитного резонанса (ЭПР, ЯМР, ЯКР, эффект Мёссбауэра). Особенности моделирования спектров магнитного резонанса монокристаллов, поликристаллов, неоднородных спиновых структур. Примеры.</p> <p>Моделирование закона дисперсии и плотности состояний фононов и магнонов. Моделирование электронной зонной структуры. Стандартные пакеты для расчета электронной структуры (CASTEP,...).</p> |
| P3 | Элементы нелинейной и стохастической динамики | <p>Случайные процессы. Знакомство с аналитическим аппаратом теории случайных процессов (стохастические дифференциальные уравнения, стохастические интегралы и т.д.) и развитие навыков применения этого аппарата для решения практических задач. Бифуркации и катастрофы динамических систем. Гамильтоновы системы. Хаос в динамических системах. Фракталы. Стохастическое поведение динамических систем. Броуновское движение. Уравнение Ланжевена.</p> <p>Анализ и прогнозирование временных рядов. Интерполяция, экстраполяция, фильтрация, спектральный анализ, вейвлет-анализ, адаптивные методы, фрактальный анализ, и т.д.).</p> |
| P4 | Элементы термодинамического описания твердых тел и фазовых переходов. | <p>Термодинамические потенциалы. Обобщенные восприимчивости. Параметры порядка. Феноменологическая теория фазовых переходов Ландау - Гинзбурга. Симметрия и фазовые переходы. Критерии Лифшица. Особенности поведения восприимчивостей при фазовом переходе. Фазовые переходы первого рода. Сосуществование фаз, гистерезис. Спонтанные и индуцированные спин-переориентационные переходы в магнетиках. Фазовые диаграммы. Квантовые фазовые переходы. Особенности низкоразмерных систем. Переход Березинского-Костерлица-Таулесса.</p> <p>Моделирование структуры основного состояния и фазовых переходов в низкоразмерном магнетике. Моделирование структуры основного состояния и фазовых переходов в низкоразмерной псевдоспиновой системе типа локальных бозонов или ультра-холодных атомов в оптической решетке.</p> |
| P5 | Псевдоспиновые модели | <p>Псевдоспиновый формализм. Элементы спиновой алгебры. Модели Гейзенберга и Изинга. Классические и квантовые модели. Квантовые магнетики. Псевдо-спиновые модели. Классический и квантовый решеточный газ. Сегнетоэлектрики типа порядок-беспорядок. Системы с переменной валентностью. Бинарные сплавы типа АВ. Псевдоспиновое описание нейронных сетей.</p> <p>Скирмионо-подобные топологические возбуждения в спиновых 2D системах. Топологические квантовые числа.</p> |

| | | |
|--|--|---|
| | | Скирмион Белавина-Полякова. Стабильность топологических структур. |
|--|--|---|

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Методы теоретической физики в естественных науках

Электронные ресурсы (издания)

1. Прудников, В. В.; Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования : учебное пособие.; Физматлит, Москва; 2009; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68374> (Электронное издание)
2. Москвин, А. С.; Атомы в кристаллах : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2018; <http://www.iprbookshop.ru/107024.html> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Прудников, В. В., Вакилов, А. Н., Прудников, П. В.; Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования : учеб. пособие для студентов вузов по направлению "Приклад. математика и физика".; ФИЗМАТЛИТ, Москва; 2009 (2 экз.)
2. Вонсовский, С. В.; Квантовая физика твердого тела; Наука, Москва; 1983 (23 экз.)
3. Лоскутов, А. Ю.; Введение в синергетику; Наука, Москва; 1990 (9 экз.)
4. Стенли, Г., Мицек, А. И., Шубина, Т. С., Вонсовский, С. В.; Фазовые переходы и критические явления; Мир, Москва; 1973 (8 экз.)
5. Ермаков, С. М.; Метод Монте-Карло и смежные вопросы; Наука, Москва; 1975 (3 экз.)
6. Бетгер, Х., Буздин, А. И., Долгов, О. В., Булаевский, Л. Н.; Принципы динамической теории решетки; Мир, Москва; 1986 (2 экз.)
7. Москвин, А. С.; Атомы в кристаллах : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2018 (10 экз.)
8. Кроновер, Р. М., Ричард М., Кренкель, Т. Э., Соловейчик, А. Л.; Фракталы и хаос в динамических системах : [учеб. пособие для вузов].; Техносфера, Москва; 2006 (4 экз.)
9. Шустер, Г. Г., Израйлев, Ф. М., Малкин, М. И., Рейман, А. М., Гапонов-Грехов, А. В., Рабинович, М. И.; Детерминированный хаос. Введение; Мир, Москва; 1988 (3 экз.)
10. Паташинский, А. З.; Флуктуационная теория фазовых переходов; Наука, Москва; 1982 (2 экз.)
11. Изюмов, Ю. А.; Базовые модели в квантовой теории магнетизма; [УрО РАН], Екатеринбург; 2002 (3 экз.)
12. Овчинников, А. С., Сеницын, В. Е.; Компьютерное моделирование в физике : учебно-методическое пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2011 (20 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. American Institute of Physics <http://scitation.aip.org/>
2. American Physical Society <https://journals.aps.org/about>
3. Applied Science & Technology Source EBSCO publishing <http://search.ebscohost.com>
4. INSPEC EBSCO publishing <http://search.ebscohost.com/>
5. Institute of Physics (IOP) <http://iopscience.iop.org/>
6. Космические струны и другие топологические дефекты, http://cosmologiya.narod.ru/cambrige/cs_top.html
7. Университетская библиотека онлайн: <http://biblioclub.ru>
8. Электронная научная библиотека <https://elibrary.ru>
9. Зональная научная библиотека УрФУ. URL: <http://lib.urfu.ru>

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

1. Российская государственная библиотека. URL: <http://www.rsl.ru>
2. Государственная публичная научно-техническая библиотека России. URL: <http://www.gpntb.ru>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Методы теоретической физики в естественных науках

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 |
|-------|--------------|--|--|
| 1 | Лекции | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |

| | | | |
|---|---|---|--|
| | | Подключение к сети Интернет | |
| 2 | Практические занятия | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Подключение к сети Интернет | Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 3 | Консультации | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Не требуется |
| 4 | Текущий контроль и промежуточная аттестация | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Не требуется |
| 5 | Самостоятельная работа студентов | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Подключение к сети Интернет | Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Электронные свойства сильно
коррелированных систем

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

| № п/п | Фамилия Имя Отчество | Ученая степень, ученое звание | Должность | Подразделение |
|--------------|--------------------------------|---|------------------|---|
| 1 | Москвин Александр Сергеевич | доктор физико- математических наук, профессор | Профессор | теоретической и математической физики |

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 1 от 18.01.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Москвин Александр Сергеевич, Профессор, теоретической и математической физики

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 | Введение | Классификация и необычные физические (транспортные, тепловые, оптические, магнитные, резонансные, ...) свойства сильнокоррелированных систем. Зарядовые, орбитальные и спиновые параметры порядка в сильнокоррелированных системах. Корреляционные эффекты. |
| P2 | Теория многоэлектронного атома | От атома водорода к многоэлектронному атому. Электрон-электронное взаимодействие, параметры Слэтера. Сложение моментов. LS-связь. Термы. Спин-орбитальное взаимодействие, мультиплеты Методы расчета электронной структуры атома. |
| P3 | Атомы в кристаллах | Кристаллическое поле. Учет симметрии КП и симметрии электронных состояний. Замораживание орбитального момента в КП. Слабое, среднее, сильное поле. Низкоспиновые и высокоспиновые конфигурации. Кристаллические термы. Магнитный момент атома в кристалле. Электронная теплоемкость и парамагнитная восприимчивость. Спиновая анизотропия и эффективный g-тензор. ЭПР спектроскопия. Симметрия и электронная структура кластеров переходных элементов. Метод молекулярных орбиталей. Ковалентность. Перенос зарядовой и спиновой плотности. Основные методы квантовохимических расчетов в сильнокоррелированных системах. |

| | | |
|-----------|--|--|
| | | Разрешенные и запрещенные оптические переходы в атомах. Переходы с переносом заряда. Оптическая и магнитооптическая анизотропия. |
| P4 | Электронно-колебательные взаимодействия | Теория электронно-колебательных взаимодействий в сильнокоррелированных системах. Поляроны. Ян-теллеровские центры. Теория эффекта Яна-Теллера. |
| P5 | Взаимодействие атомов в кристаллах | Микроскопическая теория взаимодействия атомов в кристаллах. Основные спиновые взаимодействия. Спин-гамильтониан. Обменное взаимодействие Гейзенберга. Теория Андерсона кинетического и потенциального обмена. Биквадратичный обмен. Антисимметричный обмен Дзялошинского-Мория. Одно- и двухионная анизотропия. Магнитоупругие и магнитоэлектрические взаимодействия. Оптические и магнитооптические эффекты. Сверхтонкие взаимодействия. ЯМР, ЯКР, ДЭЯР и эффект Мёссбауэра. |
| P6 | Стандартные модели в теории сильнокоррелированных систем | Модель Андерсона, Модель Хаббарда, t-J-модель. Спиновые модели (Гейзенберг, Изинг, Ашкин-Теллер,...). Бозонные системы. Преобразования Гольштейна-Примакова, Иордана-Вигнера, Матсубары-Матсуды. Ограниченный базис, эквивалентные (эффективные) операторы и псевдоспиновый формализм. Примеры реализации. Обзор методов решения моделей Андерсона и Хаббарда. Учет сильных корреляций в зонных моделях. LDA+U, LDA+DMFT. |
| P7 | Актуальные сильнокоррелированные системы | Высокотемпературные сверхпроводники: фазовые диаграммы и физические свойства. Системы с переменной валентностью. Тяжелые фермионы. Колоссальное магнитосопротивление. Спинтроника. Мультиферроики. Топологические структуры. |

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Электронные свойства сильно коррелированных систем

Электронные ресурсы (издания)

1. Изюмов, Ю. А.; Электронная структура соединений с сильными корреляциями : монография.; НИЦ

«Регулярная и хаотическая динамика», Москва, Ижевск; 2009;
<https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=467651> (Электронное издание)

2. Изюмов, Ю. А.; Электронная структура соединений с сильными корреляциями; Регулярная и хаотическая динамика, Институт компьютерных исследований, Москва, Ижевск; 2019;
<http://www.iprbookshop.ru/92027.html> (Электронное издание)

3. Ирхин, В. Ю.; Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d- и f-металлах и их соединениях; Регулярная и хаотическая динамика, Институт компьютерных исследований, Москва, Ижевск; 2019; <http://www.iprbookshop.ru/92028.html> (Электронное издание)

4. Абрагам, А., А., Скроцкий, Г. В., Альтшулер, С. А.; Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов : монография.; Мир, Москва; 1973;
<https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=483223> (Электронное издание)

5. Москвин, А. С.; Атомы в кристаллах : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2018; <http://www.iprbookshop.ru/107024.html> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Изюмов, Ю. А.; Электронная структура соединений с сильными корреляциями; НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Москва; 2009 (1 экз.)

2. Бальхаузен, К., Дяткина, М. Е.; Введение в теорию поля лигандов; Мир, Москва; 1964 (5 экз.)

3. Берсукер, И. Б.; Электронное строение и свойства координационных соединений : Введ. в теорию.; Химия, Ленинград; 1986 (7 экз.)

4. Ирхин, В. Ю.; Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d- и f-металлах и их соединениях; [УрО РАН], Екатеринбург; 2004 (2 экз.)

5. Изюмов, Ю. А.; Базовые модели в квантовой теории магнетизма; [УрО РАН], Екатеринбург; 2002 (3 экз.)

6. Плакида, Н. М.; Высокотемпературные сверхпроводники; Междунар. программа образования, Москва; 1996 (1 экз.)

7. Абрагам, А., Альтшулер, С. А., Скроцкий, Г. В.; Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов : пер. с англ. Т. 2. ; Мир, Москва; 1973 (7 экз.)

8. Москвин, А. С.; Атомы в кристаллах : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2018 (10 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. American Institute of Physics <http://scitation.aip.org/>

2. American Physical Society <https://journals.aps.org/about>

3. Applied Science & Technology Source EBSCO publishing <http://search.ebscohost.com>

4. INSPEC EBSCO publishing <http://search.ebscohost.com/>

5. Institute of Physics (IOP) <http://iopscience.iop.org/>

6. Университетская библиотека онлайн: <http://biblioclub.ru>

7. Электронная научная библиотека <https://elibrary.ru>

8. Зональная научная библиотека УрФУ. URL: <http://lib.urfu.ru>

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

1. Российская государственная библиотека. URL: <http://www.rsl.ru>
2. Государственная публичная научно-техническая библиотека России. URL: <http://www.gpntb.ru>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Электронные свойства сильно коррелированных 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 |
|-------|----------------------|---|--|
| 1 | Лекции | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Подключение к сети Интернет | Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 2 | Практические занятия | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Подключение к сети Интернет | Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 3 | Консультации | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Не требуется |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 4 | Текущий контроль и промежуточная аттестация | <p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> | Не требуется |
| 5 | Самостоятельная работа студентов | <p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Подключение к сети Интернет</p> | <p>Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM</p> <p>Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> |