

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 целям 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 целей 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

1. Брандт, Н. Б., Чудинов, С. М.; Электронная структура металлов : Учеб. пособие для физ. специальностей вузов.; Московский университет, Москва; 1973 (20 экз.)
2. Кикоин, К. А.; Электронные свойства примесей переходных металлов в полупроводниках; Энергоатомиздат, Москва; 1991 (1 экз.)
3. , Немошкаленко, В. В.; Методы вычислительной физики в теории твердого тела: электронная структура идеальных и дефектных кристаллов; Наукова думка, Киев; 1991 (2 экз.)
4. Кашурников, В. А., Красавин, А. В.; Численные методы квантовой статистики; ФИЗМАТЛИТ, Москва; 2010 (2 экз.)
5. 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