

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
1153282	Квантовые вычисления

Екатеринбург

<b>Перечень сведений о рабочей программе модуля</b>	<b>Учетные данные</b>
<b>Образовательная программа</b> 1. Прикладные математика и физика	<b>Код ОП</b> 1. 03.03.01/33.01
<b>Направление подготовки</b> 1. Прикладные математика и физика	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 1. 03.03.01

Программа модуля составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
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 Квантовые вычисления

## 1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль содержит две дисциплины «Квантовые компьютеры и квантовые вычисления», «Численные методы материаловедения» и Проект по модулю. Целью курса «Квантовые компьютеры и квантовые алгоритмы» является обучение способности формулировать задачи для их решения на квантовых вычислительных устройствах. В рамках курса рассматривается предыстория возникновения квантовых вычислений, а также основные понятия теории такие, как кубит, сфера Блоха, квантовые логические элементы, квантовые схемы, принцип суперпозиции, запутанность. Разбираются известные квантовые алгоритмы и процедуры коррекции ошибок. Особое внимание уделяется методам моделирования физических процессов на квантовых компьютерах. В отдельной части курса изучается физическая реализация квантовых вычислительных устройств, моделей квантовых симуляторов и шума. Курс «Численные методы материаловедения» предназначен для студентов, специализирующихся в области физики конденсированного состояния вещества, физики магнитных явлений и материаловедения. В данном курсе рассматривается численное решение типовых задач квантовой физики твердого тела (движение электронов в потенциальной яме и периодическом потенциале, расчет зон Бриллюэна, туннелирование через потенциальный барьер, моделирование доменной границы и ее движения), статистической физики твердого тела (моделирование ферро- и антиферромагнетика в 2-мерной модели Изинга методом метрополиса, моделирование колебаний кристаллической решетки и нахождение фононного спектра). Так же, студенты кратко знакомятся с современным программным обеспечением, применимым для решения подобного рода задач (Mathematica, Matlab и Simulink, COMSOL Multiphysics). Цель курса – рассмотрение примеров решения типовых задач физики твердого тела и обзор современных программных продуктов, их применимости и стоимости. Рассматриваются также квантовые алгоритмы для решения задач физики твердого тела и материаловедения.

## 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	Проект по модулю Квантовые вычисления	3
2	Квантовые компьютеры и квантовые алгоритмы	4
3	Численные методы материаловедения	5
ИТОГО по модулю:		12

## 1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	1. Теоретическая физика
Постреквизиты и кореквизиты модуля	1. Машинное обучение

**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
Квантовые компьютеры и квантовые алгоритмы	ОПК-3 - Способен систематизировать, анализировать и обобщать результаты научных исследований на основе информационной и библиографической культуры	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов анализа и обобщения результатов научных исследований</p> <p>З-2 - Формулировать требования к оформлению результатов исследований</p> <p>З-3 - Демонстрировать понимание приемов и способов самостоятельного поиска и осмысления информации в соответствии с профессиональными задачами</p> <p>У-1 - Систематизировать и анализировать результаты экспериментов, наблюдений, измерений</p> <p>У-2 - Оформлять результаты исследовательской деятельности в виде обзоров литературы, справок, методик в соответствии с принятыми в профессиональной области требованиями</p> <p>У-3 - Интерпретировать результаты собственных исследований, соотнося их с данными научной литературы, формулировать заключения и выводы по результатам исследований</p> <p>П-1 - Иметь опыт представления обобщенных результатов исследовательской деятельности и их оформления в виде текстовых, графических и иных материалов в соответствии с требованиями</p> <p>П-2 - Иметь опыт написания обзоров литературы, справок, методик экспериментов, описания и обсуждения результатов экспериментов на основе информационной и библиографической культуры</p> <p>П-3 - Иметь опыт подготовки и оформления отчетов по лабораторным работам,</p>

		<p>практикам, научным исследованиям на основе информационной и библиографической культуры</p> <p>Д-1 - Демонстрировать развитие когнитивных умений</p>
	<p>ОПК-4 - Способен решать задачи профессиональной деятельности с использованием информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p>З-1 - Формулировать представления о роли современных информационно-коммуникационных технологий для решения задач профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Обосновывать выбор современных ИТ-технологий для сбора, анализа, обработки и представления информации по профилю деятельности</p> <p>П-1 - Предлагать способы сбора, анализа и обработки информации по профилю деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий</p> <p>Д-1 - Демонстрировать развитие компетенций в области ИТ</p>
<p>Проект по модулю Квантовые вычисления</p>	<p>ОПК-3 - Способен систематизировать, анализировать и обобщать результаты научных исследований на основе информационной и библиографической культуры</p>	<p>З-2 - Формулировать требования к оформлению результатов исследований</p> <p>З-3 - Демонстрировать понимание приемов и способов самостоятельного поиска и осмысления информации в соответствии с профессиональными задачами</p> <p>У-2 - Оформлять результаты исследовательской деятельности в виде обзоров литературы, справок, методик в соответствии с принятыми в профессиональной области требованиями</p> <p>У-3 - Интерпретировать результаты собственных исследований, соотнося их с данными научной литературы, формулировать заключения и выводы по результатам исследований</p> <p>П-2 - Иметь опыт написания обзоров литературы, справок, методик экспериментов, описания и обсуждения результатов экспериментов на основе информационной и библиографической культуры</p>

	<p>П-3 - Иметь опыт подготовки и оформления отчетов по лабораторным работам, практикам, научным исследованиям на основе информационной и библиографической культуры</p> <p>Д-1 - Демонстрировать развитие когнитивных умений</p>
<p>ОПК-4 - Способен решать задачи профессиональной деятельности с использованием информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p>З-1 - Формулировать представления о роли современных информационно-коммуникационных технологий для решения задач профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Обосновывать выбор современных ИТ-технологий для сбора, анализа, обработки и представления информации по профилю деятельности</p> <p>П-1 - Предлагать способы сбора, анализа и обработки информации по профилю деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий</p> <p>Д-1 - Демонстрировать развитие компетенций в области ИТ</p>
<p>ОПК-5 - Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>З-1 - Сравнить возможности различных современных программных средств для сбора, передачи, обработки и накопления информации</p> <p>У-1 - Осуществлять выбор адекватного программного обеспечения при решении задач по профилю деятельности</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения задач по профилю деятельности, используя адекватное программное обеспечение</p> <p>Д-1 - Демонстрировать развитие компетенций в области ИТ</p>
<p>ПК-1 - Способен планировать и проводить научные эксперименты в области физики конденсированного состояния и (или) теоретические (аналитические и</p>	<p>З-1 - Изложить цели и задачи производимых исследований</p> <p>У-1 - Анализировать причины возникающих погрешностей в расчетных и экспериментальных данных</p> <p>П-1 - Иметь практический опыт применения различных методов физических исследований в избранной предметной</p>

	компьютерные) исследования	области: экспериментальных методов, статистических методов обработки экспериментальных данных, методов теоретической физики, вычислительных методов, современных методов математического и компьютерного моделирования объектов и процессов
	ПК-3 - Способен критически оценивать применимость используемых алгоритмов и методов при исследовании физико-химических свойств новых функциональных материалах	З-1 - Изложить порядок проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ  У-1 - Определять оптимальные методы математического моделирования процессов  П-1 - Разрабатывать рекомендации по сертификации технических средств (оборудования, алгоритмов, программных продуктов)
	ПК-5 - Способен понимать и применять методологии проектирования в области физики конденсированного состояния и материаловедения	З-2 - Сформулировать порядок оформления научно-технической документации и заявок на приобретение приборов, материалов, другого научного оборудования  У-1 - Систематизировать информацию для решения поставленных научно-технических задач  П-1 - Иметь практический опыт сбора и составления научно-технической и другой служебной документации
Численные методы материаловедения	ОПК-5 - Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности	З-1 - Сравнить возможности различных современных программных средств для сбора, передачи, обработки и накопления информации  У-2 - Осуществлять поиск и выбор необходимых информационных баз данных для решения профессиональных задач  П-2 - Иметь опыт решения задач профессиональной деятельности с использованием современных информационных баз данных
	ПК-5 - Способен понимать и применять методологии проектирования в области физики конденсированного	З-1 - Изложить характеристики научно-производственного оборудования подразделения, правила его эксплуатации  З-2 - Сформулировать порядок оформления научно-технической документации и заявок

	состояния и материаловедения	на приобретение приборов, материалов, другого научного оборудования У-1 - Систематизировать информацию для решения поставленных научно-технических задач П-1 - Иметь практический опыт сбора и составления научно-технической и другой служебной документации
--	------------------------------	---

### **1.5. Форма обучения**

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Квантовые компьютеры и квантовые**  
**алгоритмы**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Мазуренко Владимир Владимирович	доктор физико- математических наук, доцент	Заведующий кафедрой	теоретической физики и прикладной математики
2	Сотников Олег Михайлович	нет, нет	инженер	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 Владимирович, Заведующий кафедрой, теоретической физики и прикладной математики
- Сотников Олег Михайлович, инженер, 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	Вычислительные ресурсы и пределы вычислительной мощности	Архитектура классических компьютеров, устройство памяти, принципы вычислительных операций. Закон Мура. Машина Тьюринга. Стандартные классы сложности вычислений. Физический тезис Чёрча-Тьюринга и его обобщение. Обратимые и необратимые цепи логических элементов. Диссипация энергии в необратимых цепях: принцип Ландауэра, демон Максвелла. Обратимые элементы и квантовые вычисления. Управляющие линии, контролируемые логические элементы: CNOT, элемент Тоффоли, элемент Фредкина. Физические ограничения классических компьютеров: неизбежность перехода к квантовым вычислениям.
P2	Теория квантовых вычислений и квантовой информации	Представление информации в квантовых компьютерах: аналог классического бита (кубит). Принцип суперпозиции состояний. Математическая запись состояния кубита. Глобальная и квантовая фазы. Графическое представление состояния кубита: двумерное представление, сфера Блоха, Q-сфера. Квантовые логические элементы как унитарные операторы. Универсальные квантовые операторы. Однокубитные, многокубитные и контролируемые квантовые операторы. Стандартный набор квантовых операций. Вычислительный базис и измерение, отношение с квантовым вектором состояния и матрицей плотности. Размер базиса и вид

		<p>квантовых операторов. Пря-мое и тензорное матричные произведения. Запутан-ные состояния, логический элемент Белла. Чистые и смешанные состояния. Частичное измерение: уменьшение размерности матрицы плотности состояния с уменьшением размера вычислительного базиса. Информационная энтропия (энтропия фон Неймана), взаимная энтропия. Понятие квантовой цепи, рас-пространённые цепи: сверхплотное кодирование, телепортация кубита. Ограничения, связанные с архитектурой квантового компьютера. Запутанность как физический ресурс, квантовая память</p>
<b>P3</b>	Языки программирования для квантовых вычислений	<p>Облачные сервисы для квантовых вычислений: IBMQ и Quantum Composer. Квантовый ассемблер. Высокоуровневые языки и библиотеки для языка py-thon. Qiskit Terra. Программирование квантовых цепей. Симуляторы квантовых вычислений. Выполнение расчётов на реальном квантовом компьютере и симуляторах.</p>
<b>P4</b>	Квантовые алгоритмы общего назначения	<p>Квантовые цепи и классическое программирование. Квантовый параллелизм: алгоритм Дойча и его обобщение на случай нескольких кубитов (алгоритм Дойча-Йожи). Квантовое преобразование Фурье, алгоритм Шора. Сложность классических алгоритмов поиска. Квантовый поиск: алгоритм Гровера. Задачи, демонстрирующие квантовое превосходство.</p>
<b>P5</b>	Моделирование физических процессов на квантовых компьютерах	<p>Представление спиновых и электронных моделей на квантовом компьютере. Инициализация квантового состояния. Вычисление наблюдаемых. Вариационный принцип. Эволюционный подход Троттера. Методы машинного обучения: обучение с подкреплением.</p>
<b>P6</b>	Квантовые ошибки и шум	<p>Точность квантовых вычислений. Причины возникновения ошибок: классический шум, нежелательное межкубитное взаимодействие, декогеренция квантового состояния, погрешность измерения. Процедуры коррекции квантовых ошибок. Вспомогательные кубиты. Классические модели квантовых вычислений: симулятор квантового компьютера. Сравнение сильных и слабых сторон различных видов симуляторов. Классическое моделирование квантовых ошибок.</p>
<b>P7</b>	Физическая реализация кубит и их взаимодействия	<p>Физические условия для реализации кубит их взаимодействия. Спиновые кубиты. Сверхпроводящие кубиты. Модели физической реализации квантового компьютера: ионы в ловушке, кубиты на основе ядерного магнитного резонанса, полупроводниковый зарядовый кубит, квантовые точки. Инициализация начального состояния кубит. Реализация унитарных преобразований, процедуры измерения, фазового и амплитудного вращений, двухкубитных операций.</p>

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская профорориентационная деятельность	Технология самостоятельной работы	ОПК-3 - Способен систематизировать, анализировать и обобщать результаты научных исследований на основе информационной и библиографической культуры	Д-1 - Демонстрировать развитие когнитивных умений

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Квантовые компьютеры и квантовые алгоритмы

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Шень, А. Х.; Классические и квантовые вычисления : курс.; Интернет-Университет Информационных Технологий, Москва; 2007; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=234673> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. Китаев, А.; Классические и квантовые вычисления; МЦНМО: ЧеРо, Москва; 1999 (1 экз.)
2. Стин, Стин Э., Пасынков, И. Д.; Квантовые вычисления; Регулярная и хаотическая динамика, Москва; Ижевск; 2000 (3 экз.)
3. Стин, Э., Пасынков, И. Д.; Квантовые вычисления; РХД, Москва; 2000 (5 экз.)
4. Прескилл, Дж., Нечаева, Т. С., Епифанов, С. С., Новокшенов, С. Г.; Т. 2; НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Москва; 2011 (1 экз.)
5. Прескилл, Прескилл Д., Нечаева, Т. С., Епифанов, С. С., Новокшенов, С. Г.; Квантовая информация и квантовые вычисления : [в 2 т.]. Т. 1. ; Регулярная и хаотическая динамика : Институт Компьютерных Исследований, Москва ; Ижевск; 2008 (1 экз.)
6. Прескилл, Дж., Нечаева, Т. С., Новокшенов, С. Г.; Квантовая информация и квантовые вычисления : [в 2 т.]. Т. 2. ; Регулярная и хаотическая динамика : Институт компьютерных исследований, Москва ; Ижевск; 2011 (1 экз.)
7. Кайе, Кайе Ф., Лафлам, Лафлам Р., Моска, Моска М., Никитина, Т. С., Анохин, А. В.; Введение в квантовые вычисления; Институт компьютерных исследований : Регулярная и хаотичная динамика, Москва ; Ижевск; 2009 (2 экз.)
8. , Боуместер, Д., Кулик, С. П., Цайлингер, А., Шапиро, Е. А., Экерт, А.; Физика квантовой информации. Квантовая криптография. Квантовая телепортация. Квантовые вычисления; Постмаркет, Москва; 2002 (7 экз.)

## Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека

<http://www.gpntb.ru>

2. Российская национальная библиотека

<http://www.rsl.ru/>

3. Публичная электронная библиотека

<http://www.gpntb.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

Зональная научная библиотека УрФУ со свободным доступом по студенческому билету для студентов УрФУ (<http://lib.urfu.ru/>);

Портал информационно-образовательных ресурсов УрФУ (<http://study.urfu.ru/>);

Официальный сайт Физико-технологического института (<http://fizteh.org/>).

## 3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Квантовые компьютеры и квантовые алгоритмы

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	Не требуется
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся	Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES

		Подключение к сети Интернет	
--	--	-----------------------------	--

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Численные методы материаловедения**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Андреев Сергей Николаевич	без степени, без звания	инженер	теоретической физики и прикладной математики
2	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:

- Андреев Сергей Николаевич, инженер, теоретической физики и прикладной математики
- 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	Основы квантовой механики.	Волновые функции и пространство Гильберта. Смешанные состояния и матрица плотности.  Принцип неопределенности. Уравнение Шредингера. Квантовая частица в свободном пространстве. Одночастичная квантовая задача. Метод Нумерова. Одномерная задача рассеивания. Связанные состояния и задача на собственные значения. Численное решение трехмерного уравнения Шредингера.
P2	Геометрия кристаллической решётки. Основы кристаллографии	Элементы симметрии кристаллов. Понятие кристалла, симметрии кристалла. Номенклатура преобразований симметрии: обозначения Шёнфлиса и международные, их изображение.  Решетки кристаллов. Трансляционные группы. Трансляционные группы кристалла, понятие сингонии. Решетка Бравэ, типы и описание решеток Бравэ. Элементарная ячейка, примитивная ячейка, ячейка Бравэ.  Пространственные группы кристаллов. Открытые элементы симметрии, их обозначения. Принципы написания символов пространственных групп.

		<p>Обратная решетка и зоны Бриллюэна. Определение обратной решетки, построение обратных решеток для ГЦК, ОЦК. Определение зоны Бриллюэна.</p> <p>Структурная релаксация.</p>
<b>P3</b>	Метод Хартри-Фока	<p>Электронная структура молекул и атомов твердых тел. Задача электронной структуры. Базисные функции. Электронный газ. Орбитали Слэтера. Орбитали Гаусса. Метод Хартри-Фока. Уравнение Хартри-Фока. Уравнение Хартри-Фока в неортогональном базисе</p>
<b>P4</b>	Теория функционала плотности	<p>Функционал электронной плотности. Основные положения ФЭП. Теоремы Хоэнберга — Кона. Вариационный принцип. Уравнение Кона-Шэма. Сравнение с методом Хартри-Фока.</p> <p>Приближение локальной электронной плотности. LDA, LSDA. Преимущества и недостатки локальной электронной плотности.</p> <p>Методы более точного описания обменнокорреляционного потенциала. GGA. SIC-LDA (self- interaction correction) Метод GW. Приближение LDA+U. Основа LDA+U. Расщепление одноэлектронных состояний. Полная энергия как функция полного числа частиц. Энергия обменного взаимодействия. Функционал приближения LDA+U.</p> <p>Методы расчета зонной структуры: Энергетические зоны электронов. Блоховские функции.</p> <p>Плотность состояний и интегрирование в обратном пространстве методом тетраэдров.</p> <p>Приближение сильной связи. Гамильтониан. Функции Ванье. Интегралы перекрытия. МТ-потенциал. Метод присоединенных плоских волн. Метод ортогонализированных плоских волн. Метод Корринги-Кона-Ростокера. Метод псевдопотенциала.</p>
<b>P5</b>	Теория динамического среднего поля	<p>Определение коррелированных и некоррелированных электронов. Гамильтониан кристалла с некоррелированными электронами в приближении сильной связи, в прямом и обратном пространстве. Функция Грина такого кристалла и ее связь с спектром плотности электронных состояний. Энергетическое представление электронных корреляций - собственная энергетическая часть (СЭЧ). Приближение локальная собственной энергетической части (считаем, что СЭЧ не зависит от <math>K</math>, а зависит только от <math>\omega</math> - ЛСЭЧ) Связь функций Грина кристалла с коррелированными и некоррелированными электронами через уравнение Дайсона.</p> <p>Главная идея метода среднего поля. Модель Хаббарда и модель Андресона. Метод динамического среднего поля как метод расчета ЛСЭЧ. Эффективная примесь и эффективная среда, эффективная модель Андерсона. Формула для расчета функции Грина эффективной примеси с некоррелированными</p>

		электронами. Численные методы расчета функции Грина эффективной примеси с коррелированными электронами. Расчет ЛСЭЧ с помощью уравнения Дайсона (через принцип тождественности ЛСЭЧ узла кристалла и приме-си). Расчет функции Грина эффективной среды исходя из ЛСЭЧ и функции Грина кристалла с коррелированными электронами. Численные методы определения новых параметров эффективной примеси.
<b>Р6</b>	Методы расчетов систем содержащих примеси	Метод суперячеек. Метод виртуального кристалла. Метод когерентного потенциала.

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская профориентационная деятельность	Технология самостоятельной работы	ОПК-5 - Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности	У-2 - Осуществлять поиск и выбор необходимых информационных баз данных для решения профессиональных задач П-2 - Иметь опыт решения задач профессиональной деятельности с использованием современных информационных баз данных

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Численные методы материаловедения

#### Электронные ресурсы (издания)

- Ландау, Л. Д.; Кватовая механика 1. ; Государственное издательство технико-теоретической литературы, Москва|Ленинград; 1948; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=474072> (Электронное издание)
- 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)

3. , Ржевская, С. В.; Материаловедение: практикум : учебное пособие.; Логос, Москва; 2006;  
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=89915> (Электронное издание)

#### **Печатные издания**

1. Коэн-Таннуджи, К., Диу, Б., Лалоз, Ф., Новиков, Л. Н.; Квантовая механика : в 2 т. Т. 1. ; УрГУ, Екатеринбург; 2000 (85 экз.)

2. Коэн-Таннуджи, К., Диу, Б., Лалоз, Ф., Новиков, Л. Н.; Квантовая механика : в 2 т. Т. 2. ; УрГУ, Екатеринбург; 2000 (85 экз.)

3. , Позднеев, Д. Б.; Машинное моделирование при исследовании материалов. Моделирование на ЭВМ дефектов кристалл. решетки : Сб. пер.; Мир, Москва; 1974 (2 экз.)

#### **Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы**

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека

<http://www.gpntb.ru>

2. Российская национальная библиотека

<http://www.rsl.ru>

3. Публичная электронная библиотека

#### **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**

<http://fizteh.org/> - Официальный сайт физико-технического факультета.

Bilbao Crystallographic server <http://www.cryst.ehu.es/>

<http://www.mielt.ru/dir/cat15/subj172.html>

### **3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

#### **Численные методы материаловедения**

**Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением**

№ п/п	Виды занятий	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p>	Не требуется
2	Лабораторные занятия	<p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>VASP 5.2</p> <p>Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG</p> <p>SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p>