

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 25.08.2023 15:48:39

Уникальный идентификатор документа:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

## Рабочая программа дисциплины (модуля)

# Квантово-механическое моделирование материалов

Закреплена за подразделением

Кафедра теоретической физики и квантовых технологий

Направление подготовки

03.04.02 ФИЗИКА

Профиль

Квантовое материаловедение

Квалификация

Магистр

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

3 ЗЕТ

Часов по учебному плану

108

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

зачет с оценкой 2

аудиторные занятия

51

самостоятельная работа

57

### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	2 (1.2)		Итого	
	Неделя			
Неделя	18			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	17	17	17	17
Лабораторные	34	34	34	34
Итого ауд.	51	51	51	51
Контактная работа	51	51	51	51
Сам. работа	57	57	57	57
Итого	108	108	108	108

Программу составил(и):

*к.ф.-м.н., доцент, Смирнова Екатерина Александровна; д.ф.-м.н., ведущий эксперт, Абрикосов Игорь Анатольевич*

Рабочая программа

**Квантово-механическое моделирование материалов**

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - магистратура Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» по направлению подготовки 03.04.02 ФИЗИКА (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

03.04.02 ФИЗИКА, 03.04.02-МФ3-23-2.plx Квантовое материаловедение, утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.06.2023, протокол № 5-23

Утверждена в составе ОПОП ВО:

03.04.02 ФИЗИКА, Квантовое материаловедение, утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.06.2023, протокол № 5-23

Рабочая программа одобрена на заседании

**Кафедра теоретической физики и квантовых технологий**

Протокол от 22.06.2021 г., №11/21

Руководитель подразделения д.ф.-м.н. профессор Мухин С.И.

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ**

1.1	Цель дисциплины – ознакомить студентов с современными методами квантово-механического моделирования в физике конденсированного состояния, а также дать им начальное представление об основных теоретических методах и алгоритмах, используемых при расчете фундаментальных физических свойств твердых тел.
1.2	Задачи дисциплины: научить
1.3	1. основам общей теории функционала электронной плотности;
1.4	2. основным приближениям, используемые при решении задачи многих тел в квантово-механическом моделировании и границы их применимости;
1.5	3. основным алгоритмам и методам, применяемые в атомистическом моделировании твердых тел и квантоворазмерных объектов;
1.6	4. применять методы квантовой механики, электродинамики и статистической физики к описанию фундаментальных свойств твердых тел.

**2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

Блок ОП:		Б1.В.ДВ.03
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
2.1.1	Введение в современные квантовые технологии ч.1	
2.1.2	Математика квантовых технологий	
2.1.3	Нелинейная физика	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	
2.2.1	Machine learning сложных систем и квантовой материи	
2.2.2	Методы диаграммной техники и континуального интегрирования	
2.2.3	Нанопотоника	
2.2.4	Плазмоника и метаматериалы	
2.2.5	Сверхпроводящие метаматериалы для сверхвысокочастотных и терагерцовых устройств	
2.2.6	Современные квантовые технологии в полупроводниковой электронике	
2.2.7	Физика жидкокристаллических мембран	
2.2.8	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.9	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы	

**3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ**

<b>ОПК-3: Способен применять знания в области информационных технологий, использовать современные компьютерные сети, программные продукты и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть "Интернет") для решения задач профессиональной деятельности, проектировании и разработке, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки</b>
<b>Знать:</b>
ОПК-3-31 общую теорию функционала электронной плотности
<b>ПК-1: Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов научных исследований в области квантовой физики</b>
<b>Знать:</b>
ПК-1-32 основные задачи, для решения которых используются современные методы атомистического моделирования
ПК-1-31 основные области применения методов моделирования для описания свойств твердых тел
<b>ОПК-2: Способен в сфере своей профессиональной деятельности осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования, организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую деятельность для поиска, выработки и принятия решений в области физики, демонстрировать продвинутые навыки работы в лабораториях / мастерских, способность разрабатывать и проводить экспериментальные исследования, критически оценивать данные и делать выводы</b>
<b>Знать:</b>
ОПК-2-31 основные идеи, лежащие в основе методов теоретического описания взаимодействия электронов с атомными ядрами
<b>ПК-1: Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов научных исследований в области квантовой физики</b>

<b>Уметь:</b>
ПК-1-У1 обосновывать правомерность допущений и приближений, используемых при решении задач
ПК-1-У2 вести поиск необходимой информации в специальной и справочной литературе и на интернет – ресурсах
<b>ОПК-2: Способен в сфере своей профессиональной деятельности осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования, организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую деятельность для поиска, выработки и принятия решений в области физики, демонстрировать продвинутые навыки работы в лабораториях / мастерских, способность разрабатывать и проводить экспериментальные исследования, критически оценивать данные и делать выводы</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-2-У1 проводить простые оценки и расчеты величин, характерных для рассматриваемых процессов и явлений
<b>ОПК-3: Способен применять знания в области информационных технологий, использовать современные компьютерные сети, программные продукты и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть "Интернет") для решения задач профессиональной деятельности, проектировании и разработке, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-3-У1 применять методы и алгоритмы для моделирования свойств реальных кристаллов и наноразмерных систем
<b>ПК-1: Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов научных исследований в области квантовой физики</b>
<b>Владеть:</b>
ПК-1-В1 навыками использования программных пакетов для первопринципного моделирования
ПК-1-В2 навыками самостоятельной работы с литературой для поиска информации о понятиях, терминах, задачах и проблемах, объяснения их решения в практических ситуациях
<b>ОПК-2: Способен в сфере своей профессиональной деятельности осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования, организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую деятельность для поиска, выработки и принятия решений в области физики, демонстрировать продвинутые навыки работы в лабораториях / мастерских, способность разрабатывать и проводить экспериментальные исследования, критически оценивать данные и делать выводы</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-2-В1 навыками разработки программных средств для обработки и систематизации полученных результатов атомистического моделирования
<b>ОПК-3: Способен применять знания в области информационных технологий, использовать современные компьютерные сети, программные продукты и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть "Интернет") для решения задач профессиональной деятельности, проектировании и разработке, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-3-В1 навыками качественного и количественного анализа фундаментальных свойств, явлений и процессов в твердых телах

#### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Формируемые индикаторы компетенций	Литература и эл. ресурсы	Примечание	КМ	Выполняемые работы
	<b>Раздел 1. Основные подходы и основные приближения в описании электронной структуры твердого тела.</b>							
1.1	Основные подходы и основные приближения к описанию электронной структуры твердого тела. Понятие атома в твердом теле. Основные понятия квантовой физики твердого тела: зонная структура, плотность состояний. /Лек/	2	2	ОПК-3-31 ОПК-2-31	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.2			

1.2	Симметрия кристаллов. Приближение Хартри-Фока. Модель однородного электронного газа. /Лаб/	2	2	ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ПК-1-У1 ПК-1-У2 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.3 Л2.4Л3.2			P1
1.3	Решетка Браве, базис, зона Бриллюэна, теорема Блоха, обратная решетка и ее свойства. /Лаб/	2	2	ПК-1-У2 ПК-1-В2 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.3Л2.3 Л2.4Л3.2			P1
1.4	Освоение теоретического материала раздела 1 /Ср/	2	3	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1 ПК-1-У2 ОПК-2-31 ОПК-2-У1	Л1.1 Л1.3Л2.3 Л2.4Л3.2			
	<b>Раздел 2. Общая теория функционала электронной плотности.</b>							
2.1	Электронная плотность как основная характеристика системы. Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шема. /Лек/	2	2	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1 ОПК-2-31	Л1.1 Л1.3Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2 Э5			
2.2	Функционалы для обменного взаимодействия и электронной корреляции. Приближение локальной плотности (LDA), метод обобщенных градиентных поправок (GGA). /Лек/	2	2	ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.1 Л2.3 Л2.4Л3.2 Э5			
2.3	Самосогласованный расчет зонной структуры в периодическом кристалле. Общая схема самосогласованного решения уравнений Кона-Шема. Теорема Гельмана-Фейнмана. /Лек/	2	2	ОПК-3-31 ПК-1-32 ПК-1-У1 ОПК-2-31	Л1.1 Л1.3Л2.3 Л2.4Л3.2 Э5			
2.4	Интегрирование по зоне Бриллюэна, учет симметрии. Точность расчетов. Функционал полной энергии. /Лаб/	2	2	ОПК-3-У1 ОПК-3-В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4			P1
2.5	Основные современные техники учета многочастичных взаимодействий. /Лаб/	2	2	ПК-1-У2 ПК-1-В2	Л1.1 Л2.4 Л1.3Л2.3Л3.2 Э5			P1
2.6	Программные пакеты для первопринципных расчетов. /Лаб/	2	2	ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5			P1
2.7	Расчет электронной структуры в базе плоских волн. Электрон в слабом периодическом потенциале. Формфактор и структурный фактор. Приближение «маффин-тин» потенциала и приближение атомной сферы в кристаллическом потенциале. /Лек/	2	2	ОПК-3-31 ОПК-2-31	Л1.1 Л1.3Л2.2 Л2.4Л3.2			

2.8	Введение в метод псевдопотенциала и технику РАW. Метод проектора присоединенных волн (РАW). Спектр возбуждений. Метод функций Грина и матрицы рассеяния. Конструирование базиса МТ-орбиталей. /Лек/	2	2	ОПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-32 ОПК-2-31	Л1.1 Л1.3Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.2			
2.9	Расчет равновесных объемов, объемных модулей, плотности состояний для чистых элементов. Сравнение с экспериментом. /Лаб/	2	4	ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э1 Э2 Э3 Э4			Р1
2.10	Расчет энергии и равновесной длины связи молекулы водорода, кислорода, азота, хлора, фтора. /Лаб/	2	2	ПК-1-У1 ПК-1-У2 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э1 Э2 Э3 Э4			Р1
2.11	Освоение теоретического материала раздела 2 /Ср/	2	5	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1 ПК-1-У2 ОПК-2-31 ОПК-2-У1	Л1.1 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.2 Э5			
	<b>Раздел 3. Приближения и аппроксимации для моделирования реальных систем.</b>							
3.1	Учет дефектов и нестехиометрии: приближение когерентного потенциала и метод суперячеек. Линейное масштабирование методов. /Лек/	2	2	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ПК-1-31 ОПК-2-31 ОПК-2-У1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э5			
3.2	Блоховская спектральная функция. Локальные и дальнедействующие взаимодействия в квантовой механике. Линейное скалирование методов с локализованными орбитальями. /Лаб/	2	4	ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э1 Э2 Э3 Э4			Р1
3.3	Магнитная структура. Метод неупорядоченных магнитных моментов. /Лаб/	2	2	ПК-1-У1 ПК-1-У2 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2			Р1
3.4	Исследование упорядоченных соединений и неупорядоченных сплавов (в приближении когерентного потенциала), расчет энтальпии смещения и магнитной структуры /Лаб/	2	4	ПК-1-У1 ПК-1-В1 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э1 Э2 Э3 Э4			Р1

3.5	Исследование чистых элементов и упорядоченных соединений с помощью пакета программ VASP или ABINIT или Quantum Espresso. Моделирование неупорядоченных сплавов с использованием квазиразупорядоченных ячеек (SQS). /Лаб/	2	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э1 Э2 Э3 Э4			P1
3.6	Освоение теоретического материала раздела 3 /Ср/	2	34	ОПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-32 ОПК-2-31	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э5			
<b>Раздел 4. Динамика решетки.</b>								
4.1	Динамика решетки. Фононы и проблема динамической стабильности. Матрица силовых констант. /Лек/	2	3	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ПК-1-31 ПК-1-32 ОПК-2-31 ОПК-2-У1	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2			
4.2	коллоквиум /Лаб/	2	4	ОПК-3-В1 ПК-1-В1 ПК-1-В2 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3		КМ1	
4.3	Освоение теоретического материала раздела 4 /Ср/	2	15	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ПК-1-У2 ПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2			

### 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

#### 5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки

Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
КМ1	коллоквиум	ОПК-3-31;ОПК-2-31;ПК-1-31;ПК-1-32	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Периодические электронные зоны.</li> <li>2. Периодичность, теорема Блоха и зоны Бриллюэна.</li> <li>3. Приближение Хартри-Фока.</li> <li>4. Локальные магнитные моменты и модель Гейзенберга.</li> <li>5. Единая модель электронного газа.</li> <li>6. Теорема Хоэнберг-Кона.</li> <li>7. Уравнения Кона-Шема.</li> <li>8. Функционалы обмена и корреляции.</li> <li>9. Приближение локальной плотности (LDA).</li> <li>10. Приближение локальной спиновой плотности (LSDA).</li> <li>11. Обобщенные градиентные приближения (GGA)</li> <li>12. Ограничения LDA и GGA.</li> <li>13. Электрон в слабом периодическом потенциале.</li> <li>14. Кристаллы и молекулы. Выбор базисных волновых функций.</li> <li>15. Теорема Хеллмана Феймана.</li> <li>16. МТ-приближение (МТ) и приближение (АSA) атомной сферы для кристаллических потенциалов.</li> <li>17. Приближение когерентного потенциала (CPA).</li> <li>18. Псевдопотенциалы.</li> <li>19. Метод проектора дополненной волны (метод PAW).</li> <li>20. Различные способы рассеяния: подход ККР</li> <li>21. Метод локальносамосогласованных функций Грина (LSGF).</li> <li>22. Суперчейка подход.</li> <li>23. Модель неупорядоченных магнитных моментов (DLM).</li> </ol>

<b>5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)</b>			
Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы
P1	защита лабораторных работ	ОПК-3-31;ОПК-2-31;ПК-1-В2;ПК-1-В1;ОПК-2-В1;ОПК-2-У1;ПК-1-У2;ПК-1-У1;ПК-1-31;ОПК-3-В1;ПК-1-32;ОПК-3-У1	Примеры вопросов: 1. Написать вектора и базис ОЦК решетки 2. Вычислить радиус Вигнера-Зейтца ГЦК решетки 3. Методика расчета плотности состояний 4. Методика расчета ширины запрещенной зоны 5. Методика расчета объемного модуля 6. Построение квазиразупорядоченных суперячеек. Параметр ближнего порядка 7. Методика расчета неупорядоченных сплавов (приближение когерентного потенциала) 8. Методика расчета ферромагнитных состояний. 9. Термодинамическая стабильность неупорядоченных сплавов 10. Методика расчета зонной структуры

### 5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (описание билетов, тестов и т.п.)

По курсу предусмотрен экзамен в третьем семестре.

Форма экзамена - ответ на экзаменационный билет. Пример экзаменационного билета в Приложении

1. Уравнения Кона-Шема.

2. Метод локальносамосогласованных функций Грина (LSGF).

### 5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)

«Отлично» Обучающийся глубоко и содержательно раскрывает ответ на каждый теоретический вопрос, не допустив ошибок. Ответ носит развернутый и исчерпывающий характер

«Хорошо» Обучающийся в целом раскрывает теоретические вопросы, однако ответ хотя бы на один из них не носит развернутого и исчерпывающего характера

«Удовлетворительно» Обучающийся фрагментарно раскрывает содержание теоретических вопросов, допускает значительные неточности

«Неудовлетворительно» Обучающийся не знает ответов на поставленные теоретические вопросы

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

### 6.1. Рекомендуемая литература

#### 6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Ашкрофт Н., Мермин Н.	Физика твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1979
Л1.2	Ашкрофт Н., Мермин Н.	Физика твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1978
Л1.3	Киттель Ч., Гусев А. А.	Введение в физику твердого тела: учеб. руководство	Библиотека МИСиС	М.: МедиаСтар, 2006

#### 6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Займан Д. М., Бонч-Бруевич В. Д.	Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах: монография	Электронная библиотека	Москва: Изд-во иностр. лит., 1962
Л2.2	Харрисон У., Сурис Р. А.	Теория твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1972
Л2.3	Марч Н., Янг У., Сампантхар С., Зубарев Д. Н., Плакида Н. М.	Проблема многих тел в квантовой механике	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1969
Л2.4	Займан Д.	Принципы теории твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1974



**6.1.3. Методические разработки**

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
ЛЗ.1	Векилов Ю. Х., Кузьмин Ю. М.	Дифракционные и резонансные методы исследования структуры металлов и сплавов: Разд.: Динамика кристаллической решетки и электрон-фанонное взаимодействие: курс лекций для студентов спец. 11.05	Библиотека МИСиС	М.: Учеба, 1989
ЛЗ.2	Векилов Ю. Х., Кузьмин Ю. М.	Дифракционные и резонансные методы исследования структуры металлов и сплавов: Разд.: Современные теоретические методы исследования электронной структуры твердых тел: курс лекций для студентов спец. 11.05	Библиотека МИСиС	М.: Учеба, 1989

**6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»**

Э1	VASP Vienna ab initio packet Пакет программ первопринципного моделирования	<a href="https://www.vasp.at/wiki/index.php/The_VASP_Manual">https://www.vasp.at/wiki/index.php/The_VASP_Manual</a>
Э2	ABINIT Пакет программ первопринципного моделирования	<a href="https://docs.abinit.org/tutorial/">https://docs.abinit.org/tutorial/</a>
Э3	QUANTUM ESPRESSO Пакет программ первопринципного моделирования	<a href="https://www.quantum-espresso.org/resources/tutorials">https://www.quantum-espresso.org/resources/tutorials</a>
Э4	EMTO Пакет программ первопринципного моделирования	<a href="https://emto.gitlab.io/">https://emto.gitlab.io/</a>
Э5	Введение в теорию функционала плотности	<a href="http://master-mcn.u-strasbg.fr/wp-content/uploads/2015/09/DFT.pdf">http://master-mcn.u-strasbg.fr/wp-content/uploads/2015/09/DFT.pdf</a>

**6.3 Перечень программного обеспечения**

П.1	LMS Canvas
П.2	Python
П.3	ОС Linux (Ubuntu) / Windows
П.4	Putty
П.5	Xming server
П.6	VASP
П.7	ABINIT
П.8	QUANTUM ESPRESSO
П.9	EMTO

**6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных**

И.1	Полнотекстовые российские научные журналы и статьи:
И.2	— Научная электронная библиотека eLIBRARY <a href="https://elibrary.ru/">https://elibrary.ru/</a>
И.3	Иностранные базы данных (доступ с IP адресов МИСиС):
И.4	— аналитическая база (индексы цитирования) Web of Science <a href="https://apps.webofknowledge.com">https://apps.webofknowledge.com</a>
И.5	— аналитическая база (индексы цитирования) Scopus <a href="https://www.scopus.com/">https://www.scopus.com/</a>
И.6	— наукометрическая система InCites <a href="https://apps.webofknowledge.com">https://apps.webofknowledge.com</a>
И.7	— научные журналы издательства Elsevier <a href="https://www.sciencedirect.com/">https://www.sciencedirect.com/</a>

**7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ**

Ауд.	Назначение	Оснащение
------	------------	-----------

Б-1003	Учебная аудитория:	доска аудиторная меловая, экран проекционный, проектор, документ камера, панель плазменная Panasonic, стационарные компьютеры 16 шт., пакет лицензионных программ MS Office, комплект учебной мебели
Читальный зал №3 (Б)		комплект учебной мебели на 44 места для обучающихся, МФУ Xerox VersaLink B7025 с функцией масштабирования текстов и изображений, 8 ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus.
Любой корпус Мультимедийная	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и/или для проведения практических занятий:	комплект учебной мебели до 36 мест для обучающихся, мультимедийное оборудование, магнитно-маркерная доска, рабочее место преподавателя, ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus

### 8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Дисциплина относится к естественным наукам и требует значительного объема самостоятельной работы. Качественное освоение дисциплины возможно только при систематической самостоятельной работе.