

Наименование дисциплины: Б1.В.ДВ.1 (2) «Квантовая химия твердого тела»

Направление подготовки: 03.06.01 «Физика и астрономия»

Направленность: 01.04.07 «Физика конденсированного состояния»

Квалификация выпускника – «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Цели и задачи изучения дисциплины

Цель: дать аспирантам достаточно полное и строгое представление об основах квантовой химии и молекулярной динамики, а также привить им базовые навыки проведения квантово-химических расчетов. На ознакомительном уровне аспирантам будет рассказано о современных тенденциях развития квантовой химии.

Задачи: - научиться описывать состояния атомов, молекул, микрочастиц и их систем, изменение этих состояний во времени, уровни энергии систем частиц, их импульсные и пространственные характеристики как в стационарном состоянии, так и во времени, а также переходы между состояниями;

- расширить знания о строении атомов и молекул, природе химических связей, а также движущих силах химической реакции;

- раскрыть связь дисциплины с другими разделами науки.

Требования к результатам освоения дисциплины

Универсальные компетенции:	
УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
УК-5	способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития
Общепрофессиональные компетенции:	
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий
ОПК-2	готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования
Профессиональные компетенции:	
ПК-1	способностью использовать знания фундаментальных разделов, современных проблем и новейших достижений физики в своей научно-исследовательской деятельности
ПК-2	способностью выполнять теоретические и экспериментальные исследования в области физического материаловедения
ПК-4	способностью преподавать физико-математические дисциплины в учреждениях высшего профессионального образования на основе полученного фундаментального образования и научного мировоззрения

Объем дисциплины и виды учебной работы:

Вид учебной работы	Трудоемкость, уч. часов	
	Всего	Семестр № 3
Общая трудоемкость дисциплины	108	108
Аудиторные занятия, в том числе:	20	20

лекции	10	10
лабораторные работы	0	0
практические/семинарские занятия	10	10
Самостоятельная работа	88	88
Вид промежуточной аттестации (итогового контроля по дисциплине)	Зачет	Зачет

Содержание дисциплины:

1. Методы численного анализа
2. Ядерные степени свободы
3. Стандартные методы моделирования физических, химических и биологических процессов
4. Базисные наборы и псевдопотенциалы
5. Теория функционала плотности
6. Коррелированные методы
7. Методы молекулярной динамики в моделировании кластерных систем
8. Компьютерная реализация моделирования кристаллических структур
9. Учет влияния окружения.

Разработчики: старший научный сотрудник лаб.№ 35.1, к.ф.-м.н. Мясникова А.С., старший научный сотрудник лаб.№ 35.1, к.ф.-м.н. Мысовский А.С.