

Практикум

Компьютерное моделирование многоатомных систем

Павлова Татьяна Витальевна

2022

Содержание

1	Подключение к серверу и запуск задачи	3
2	Оптимизация координат молекулы	6
3	Энергия связи молекулы	7
4	Распределение зарядов в молекуле	8
5	Колебания молекулы	9
6	Расчет параметра решетки кристалла	10
7	Поверхность кристалла	12
8	Молекула на поверхности металла	14
9	DOS полупроводника	16
10	Анализ научной статьи	18
11	Индивидуальный проект	19

Курс создан для тех, кто никогда не занимался квантово-химическими расчетами, не занимается ими в текущей работе и не планирует ими заниматься в ближайшем будущем.

Целью семестрового курса является ознакомить студентов с методами расчетов многоатомных систем и сформировать навыки критической оценки научных публикаций, результаты которых получены с использованием квантово-химических расчетов. Подавляющее большинство студентов и аспирантов не используют расчеты в своей научной работе, поэтому целью курса не является применение студентами расчетов для решения научных задач (впрочем, освоить за одно-два занятия в неделю методы расчетов так, чтобы их свободно применять в научной работе — все равно невозможно). Учитывая, что в различных областях физики число публикаций, в которых используются расчеты, огромно и постоянно растет, полученные навыки будут очень актуальны.

В данном курсе моделирование многоатомных систем рассматривается в рамках теории функционала плотности с применением программного пакета VASP. Курс начинается с моделирования систем с минимальным числом атомов — молекул. На примере молекул объясняется, как оптимизировать координаты, а также как рассчитывать такие характеристики, как энергию разрыва молекулы, колебания атомов, распределение электронной плотности. Далее рассматриваются твердые тела, которые можно задавать одним или несколькими атомами в элементарной ячейке. Курс заканчивается моделированием молекул на поверхности твердых тел — системой, состоящей из достаточно большого числа различных атомов. Для успешного освоения курса необходимо знание квантовой механики и физики твердого тела.

1 Подключение к серверу и запуск задачи

Копирование файлов на сервер

Подключитесь к серверу, на котором установлен VASP. Например, через бесплатный клиент для Windows: WinSCP www.winscp.net. Эта программа нужна для копирования файлов между компьютером и сервером. Откройте программу, создайте новую сессию и не забудьте ее сохранить. Host name: 82.179.106.112, логин: hse (или asp для аспирантов), пароль выдается на занятии.

В папке hse/2022 (или asp/2022 для аспирантов) создайте папку со своей фамилией (на английском). Клавиша F7 — создать папку. Называйте папки только по-английски. Скопируйте папку с примером hse/2020/Example1/CO в свою папку на сервере. Можно копировать через свой компьютер. Клавиша F5 — копировать.

Запуск задачи на сервере

Скачайте программу PuTTY для запуска программы VASP на сервере (www.putty.org) или скопируйте на свой компьютер старую версию из папки hse/programs) и запустите у себя на компьютере exe-файл. Создайте новую сессию так же как и в программе WinSCP и сохраните ее.

Откройте PuTTY, подключитесь к серверу, зайдите в свою папку с примером (можно использовать команду mc) и запустите задачу: в командной строке наберите **nohup vasp**. Информация о решении задачи будет записываться в файл nohup в папке с примером. Можно отслеживать решение, проверяя файл nohup (в WinSCP зайти в папку с примером и обновить файлы, Ctrl+r). После завершения решения задачи в VASP, в PuTTY снова появится командная строка.

Основные команды в PuTTY:

mc — открыть файл-менеджер в Linux: Midnight Commander.

Ctrl+o — переключение между Midnight Commander и командной строкой.

Ctrl+c — прервать решение задачи.

стрелка вверх, ↑ — вызвать старую команду.

Программа VASP

Подробная информация о программе: <https://www.vasp.at/wiki>

VASP — программа для расчета многоатомных систем, в которую заложено множество алгоритмов, подходов, методологий, которые добавлялись, исправлялись, обновлялись и модифицировались в течение многих лет. В зависимости от параметров запуска задачи, точность решения и время расчета могут очень сильно различаться. Поэтому грамотное применение программы VASP требует тщательного подбора параметров для оптимального соотношения между точностью и эффективностью, что приобретает только с опытом.

Основные файлы для запуска задачи в VASP

В большинстве случаев, параметры задачи в программе VASP задаются в четырех входных файлах: INCAR, POSCAR, POTCAR, KPOINTS.

INCAR

Это основной файл с параметрами. В файле INCAR указывается, что считать: структуру, колебания в известной структуре, электронный спектр и др. Задаются алгоритмы решения, ставится условие сходимости, задается точность, количество плоских волн, и др. Пример очень скудного задания параметров (для остальных параметров VASP подставляет значения по умолчанию):

```
SYSTEM = Hello World # название задачи
```

```
ISMEAR = 0 # размытие границ плотности состояний Гауссовой функцией
```

```
ISPIN = 2 # спин-поляризованные вычисления
```

Символ # может использоваться в файлах для комментариев. Описание параметров и их значения по умолчанию Вы найдете на сайте vasp.at/wiki.

POSCAR

В файле POSCAR задается информация о структуре системы: суперячейка, которая транслируется в пространстве, координаты атомов с указанием условий оптимизации каждой координаты (если необходимо). Пример файла POSCAR для атома водорода, двух атомов углерода и атома азота, помещенных в "вакуумный ящик" размером $8 \times 9 \times 10 \text{ \AA}^3$ для моделирования кластера атомов в периодических граничных условиях:

```
H atom in a box # название задачи
```

```
1.0 # универсальный масштабирующий параметр
```

```
8.0 0.0 0.0 # первый вектор трансляции, задающий суперячейку
```

```
0.0 9.0 0.0 # второй вектор трансляции, задающий суперячейку
```

```
0.0 0.0 10.0 # третий вектор трансляции, задающий суперячейку
```

```
H C N # тип атомов
```

```
1 2 1 # число атомов каждого типа
```

```
selective dynamic # оптимизировать выбранные координаты
```

```
cart # координаты заданы в ангстремах
```

```
4.0 4.5 5.0 F F T # положение первого атома, H, в центре "вакуумного ящика" (F — fixed, T — transferred)
```

```
4.0 4.5 6.0 T T T # положение второго атома (C 1)
```

```
4.0 4.5 7.4 T T T # положение третьего атома (C 2)
```

```
4.0 4.5 8.8 T T T # положение четвертого атома (N)
```

POTCAR

Файл POTCAR задает псевдопотенциал для каждого типа атома. Файлы для всех атомов находятся в папке hse/Potentials. Если в Вашей задаче только один тип атомов, скопируйте в папку со своей задачей нужный файл и не меняйте его. Если в задаче есть несколько типов атомов, создайте один файл POTCAR, скопировав в

него файлы POTCAR в том же порядке, что указаны в файле POSCAR. При копировании файлов в один, данные из каждого POTCAR помещаются в новую строку, пустых строк между ними быть не должно.

KPOINTS

Файл KPOINTS задает сетку К-точек, используемых для расчета в обратном пространстве.

`k-points` # название файла

`0` # автоматическая генерация сетки К-точек

`Gamma` # Гамма-центрированная сетка К-точек

`1 1 1` # используется только одна К-точка

Перед запуском каждой задачи, обязательно проверьте, есть ли 4 нужных файла в папке с задачей: INCAR, POSCAR, KPOINTS, POTCAR? Другие файлы желательно удалить, если не используете некоторые из них для продолжения решения задачи.

Основные выходные файлы VASP

Результаты расчетов записываются в 12 основных файлов (при специальных расчетах могут создаваться дополнительные файлы). Основной файл для извлечения информации — OUTCAR, в нем Вы найдете полную энергию системы, структуру после релаксации координат, действующие на атомы силы, частоты колебаний и т.д. Решение удобно визуализировать, открыв файл vasprun.xml в программе VMD. Файл OSZICAR содержит все итерации, электронные и ионные. Файл CONTCAR содержит итоговые координаты атомов и имеет такую же структуру, как файл POSCAR. Если нужно запустить задачу с координатами ионов, полученными на данном этапе решения, переименуйте файл CONTCAR в POSCAR и перезапустите задачу.

CHG — зарядовая плотность без учета плотности внутри области псевдопотенциала.

CHGCAR — полная зарядовая плотность.

CONTCAR — конечные координаты ионов.

DOSCAR — содержит данные для построения плотности электронных состояний.

EIGENVAL — содержит данные для построения зонной структуры.

IBZKPT — неприводимые К-точки.

OSZICAR — итерации решения задачи, но энергию брать из файла OUTCAR.

OUTCAR — файл с основными данными: энергией, координатами и др.

WAVECAR — используется например для создания СТМ-изображений.

XDATCAR — файл со всеми промежуточными координатами процесса релаксации.

vasprun.xml — используйте для визуализации процесса релаксации в VMD или Jmol.

2 Оптимизация координат молекулы

Каждому будет выдана простая молекула. Нужно рассчитать молекулу, визуализировать решение в программе VMD, измерить расстояние между атомами и сравнить с известными (из интернета). Нужны только 4 файла: POSCAR, POTCAR, INCAR, KPOINTS. Добавление атома в POSCAR: – добавить число атомов другого типа; – проверить что есть строка Selective Dynamics после числа атомов; – добавить F или T к каждой координате (в конце строки). F означает, что данная координата атома зафиксирована и ее перемещать нельзя, T – можно. Пример строки: 0.0 0.0 0.0 F F T

Добавление атома в POTCAR: добавить POTCAR для второго типа атома в конец файла POTCAR для первого атома, с новой строки. Файлы POTCAR для каждого типа атомов находятся в папке home/Potentials. Использовать INCAR и KPOINTS из папки hse/2020/Example1/CO.

Запустите задачу. Проверьте, что задача решена — последняя строка в файле `poehp` должна быть "reached required accuracy — stopping structural energy minimisation". Если это так, скопируйте на свой компьютер папку с решением (путь к папке на вашем компьютере должен быть полностью на английском). Если нет — значит задача еще решается или уже появилось сообщение об ошибке в файле `poehp`.

Установите VMD (есть в папке home/hse/programs или можно скачать бесплатно после регистрации последнюю версию для различных операционных систем <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>)

Откройте в VMD файл `vasprun`. File → New Molecule → (имя файла и путь к нему не должны содержать русских букв). Display → Orthographic. Graphics → Representations → Drawing Method → VDW или CPK. В главном окне есть бегунок, начальное положение соответствует заданным координатам, конечное — координатам атомов, оптимизированным в результате расчета.

Измерьте длину связи: главное окно, Mouse → Labels → bonds. Нажмите мышкой последовательно на два атома, расстояние между которыми хотите измерить. Сравните с известными значениями.

Вопросы

Чему равны длины связей атомов в молекуле?

Покажите процесс оптимизации расстояния между атомами в VMD.

3 Энергия связи молекулы

Задание: посчитать энергию связи выбранной двухатомной молекулы. Из полной энергии молекулы вычесть полные энергии отдельных атомов. Сравнить с экспериментом.

В INCAR поставьте: $ISPIN = 2$ (спин-поляризованные расчеты). Найдите оптимальное расстояние между атомами молекулы. Расположите атомы вдоль одной оси, зафиксируйте их координаты по остальным двум осям. Поставьте в POSCAR после координат F (фиксированы) или T (передвигаются). Релаксация координат: NSW=200. Параметр NSW задает максимальное число ионных циклов оптимизации координат, после которого задача принудительно останавливается, и т.о. помогает предотвратить бесконечное заикливание в случае ошибки в расчетах. При оптимизации координат нужно задавать NSW заведомо больше предполагаемого числа ионных итераций, необходимого для сходимости задачи. Если прошло NSW итераций и задача остановилась, посмотрите в конце файла `potcar` сообщение о том, что требуемая точность достигнута. Если такого сообщения нет, визуализируйте решение в VMD, и если процесс сходимости устраивает, переименуйте CONTCAR в POSCAR и перезапустите задачу.

Увеличивайте расстояние между атомами пока они не перестанут взаимодействовать (когда полная энергия не будет изменяться во втором знаке после запятой). В POSCAR измените расстояние вдоль оси, на которой находятся атомы, и запустите расчет без оптимизации геометрии: либо NSW=0, либо для всех атомов F F F.

Из полной энергии молекулы нужно вычесть полные энергии отдельных атомов. Это и будет энергия, которую необходимо сообщить молекуле для ее разрыва (активационный барьер в данной задаче не учитывается). Постройте зависимость энергии (нормированной на полную энергию оптимизированной молекулы) от расстояния между атомами.

Вопросы

Чему равна энергия связи молекулы?

Покажите график зависимости энергии от расстояния между атомами.

4 Распределение зарядов в молекуле

Задание: посчитать разницу зарядовой плотности для оптимизированной и для разорванной молекулы. Разница зарядовой плотности определяется как зарядовая плотность молекулы минус зарядовая плотность каждого отдельного атома в том же положении, в котором он находится в молекуле. При расчете оптимизации поставьте `LCHARG = .TRUE`. Расчет нужно сделать для молекулы и для каждого из атомов отдельно (т.е. оставить в POSCAR только один атом, координаты не менять). Итого получится три файла CHGCAR: для оптимизированной молекулы и каждого из двух ее атомов. Скачайте на свой компьютер файлы CHGCAR для молекулы и каждого из атомов.

Установите Vesta (есть в папке `home/hse/programs` или можно скачать бесплатно последнюю версию <http://jp-minerals.org/vesta/en/>). Откройте в Vesta CHGCAR молекулы. Вычитайте из нее файлы CHGCAR для каждого из атомов. Вычитание в программе Vesta: Edit → Edit Data → Volumetric data. Import. Operation: Subtract from current data.

Проанализируйте зарядовую плотность молекулы и сравните с невзаимодействующими атомами: где электронов стало больше, где меньше? Используйте вкладку Properties -> isosurfaces, нарисуйте отдельно positive и отдельно negative. Если молекула не целиком поместилась в отдельный вакуумный ящик, а расположена на границе, для визуализации молекулы используйте вкладку Boundary.

Повторите то же самое для разорванной молекулы — когда атомы не взаимодействуют друг с другом.

Вопросы

Покажите изображения разницы зарядовой плотности для оптимизированной и для разорванной молекул.

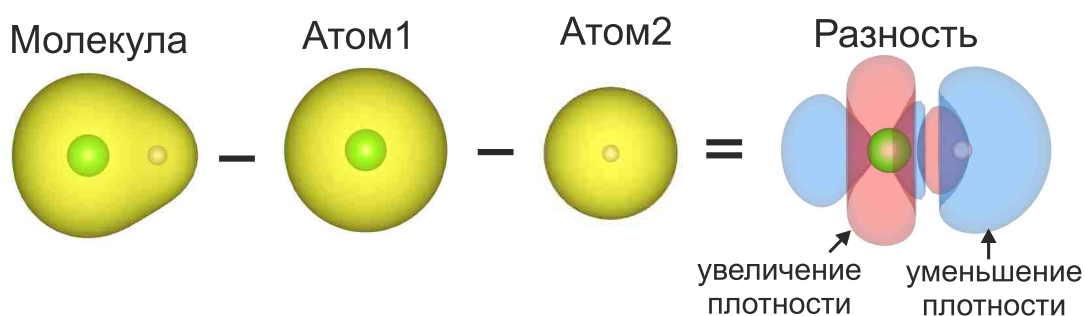


Рис. 1: Пример разности электронной плотности молекулы HCl.

5 Колебания молекулы

Запустите тестовый пример расчета колебаний CO в гармоническом приближении (скопируйте из папки `home/hse/2020/Examples/COvib`). Посмотрите частоты в конце файла OUTCAR. Значение каждой частоты приводится в различных единицах (f/i — мнимая частота). После значения частоты идут три столбца с координатами атомов и три столбца с их смещениями. Малые частоты не являются физически значимыми.

Выберете молекулу CO₂, H₂O или C₂H₂. Рассчитайте равновесную геометрию молекулы с улучшенной точностью. Для этого в INCAR измените параметр сходимости электронного цикла до 10^{-6} и ионного цикла до 0.005 эВ/Å.

Для получившейся оптимизированной молекулы запустите расчет колебаний. Для этого нужно: 1) переименовать CONTCAR в POSCAR и разрешить всем атомам релаксировать; 2) изменить или добавить в INCAR, который был использован для оптимизации молекулы:

NSW = 1 (максимальное число итераций не более одной)

IBRION = 7 (алгоритм поиска колебаний)

POTIM = 0.01 (максимальное смещение атомов)

NFREE = 2 (учитывать в алгоритме сходимости не более двух предыдущих значений).

Вопросы

Нарисуйте векторы направления смещений (колебаний) для каждой из физически значимых частот колебаний. Значения частот приведите в обратных сантиметрах.

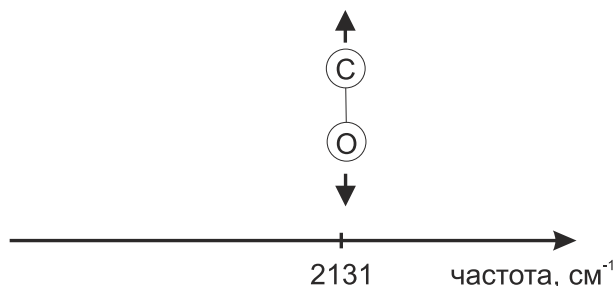


Рис. 2: Пример выполнения задания: колебания атомов в молекуле CO.

6 Расчет параметра решетки кристалла

Выберете один из кристаллов: Cu, Ag, Au, Ni, Al, Fe. Задача: найти постоянную решетки кристалла, оптимизированную в VASP. Файлы INCAR, KPOINTS возьмите из папки /home/hse/examples/Crystal. Там же есть пример POSCAR.

Метод 1

1. Задайте положения атомов в ячейке. Ячейка не обязательно должна быть элементарной. Можно выбрать кубическую решетку, тогда будет проще вырезать грани в следующей лабораторной работе. В POSCAR укажите значение параметра решетки из экспериментальных данных. Проще всего указать параметр решетки в качестве нормировочного множителя (вторая строка в POSCAR) для векторов трансляции. Обратите внимание на положения атомов при их трансляции — одновременно двух атомов не должно быть в одной точке пространства.
2. Вычислите полную энергию системы, при этом атомы перемещать не нужно;
3. Измените параметр решетки и посчитайте для него полную энергию. Проведите вычисления для различных параметров решетки в окрестности экспериментального значения, таких, чтобы найти минимум энергии.

В итоге найдите параметр решетки (с точностью до второго знака после запятой), для которого полная энергия минимальна.

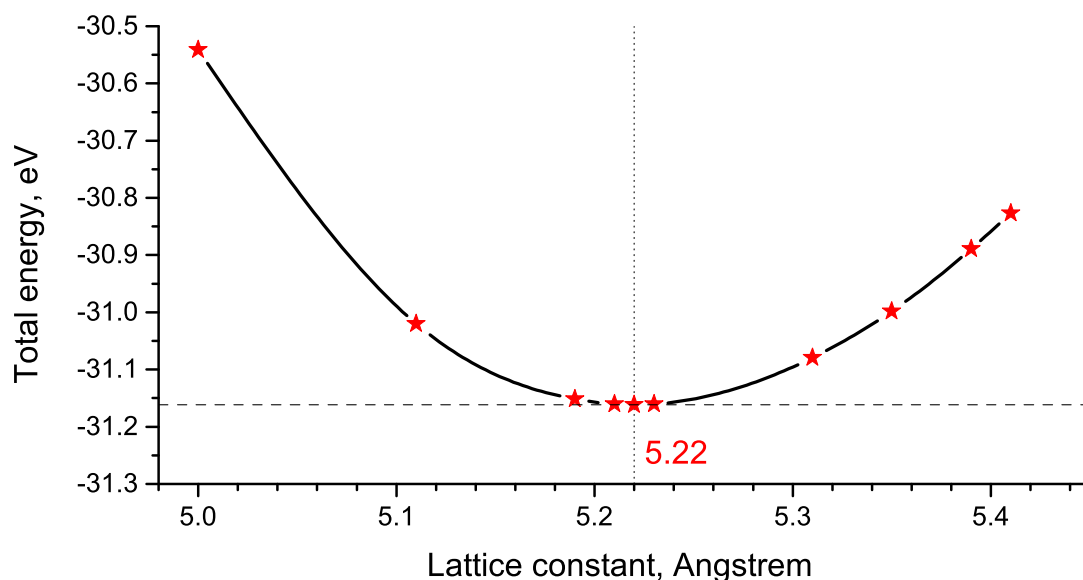


Рис. 3: Пример поиска параметра решетки CuCl, при котором полная энергия минимальна.

Метод 2

Поставьте в INCAR: $ISIF = 3$, $NSW=100$. В POSCAR укажите значение параметра решетки из экспериментальных данных. Проведите расчет энергии. Из CONTCAR выпишите полученное значение постоянной решетки.

Постоянная решетки при других параметрах

Измените параметры: уменьшите примерно на треть энергию отсечки плоских волн и число к-точек. Рассчитайте постоянную решетки любым из двух методов.

Вопросы

Постройте в VMD полученный кристалл из файла CONTCAR с оптимизированной решеткой (для любого из двух методов). Решетка кристалла похожа на то что должно было получиться?

На сколько процентов отличается рассчитанное значение постоянной решетки каждым из двух методов от экспериментального?

На сколько различаются постоянные решетки, вычисленные при разных параметрах?

7 Поверхность кристалла

Задача: расчет поверхности низкоиндексных граней металла (100), (110) и (111). Металл, для которого будете моделировать грани, возьмите из предыдущей лабораторной работы, при этом используйте рассчитанное методом 1 значение постоянной решетки.

Внесите в POSCAR координаты атомов для грани (100) поверхности из шести слоев металла. Греть должна быть параллельна плоскости XY. Вакуумный промежуток между шестислойными пластами поставьте равным 12 Å, вдоль оси Z. Пример суперячейки грани (100) с вакуумным промежутком между семислойными пластами приведен на рис. 4. Координаты можно рассчитать аналитически или в программах: VESTA (смотрите user manual), GaussView (File → new, Crystal Editor), или любых других на Ваш выбор.

В файле KPOINTS по оси Z оставьте только одну к-точку, т.к. вдоль этой оси кристаллической периодичности нет из-за наличия вакуумного промежутка. Если в каждом слое (в плоскости XY) только один атом, используйте по 9 к-точек по оси X и Y; если по какому-либо трансляционному вектору (X или Y) более одного атома в суперячейке — уменьшите число к-точек пропорционально числу атомов.

Запустите расчет релаксации в VASP, при этом оптимизируйте положения только атомов четырех верхних слоев. Из полной энергии вычислите энергию в пересчете на один атом.

Сделайте то же самое для граней (110) и (111).

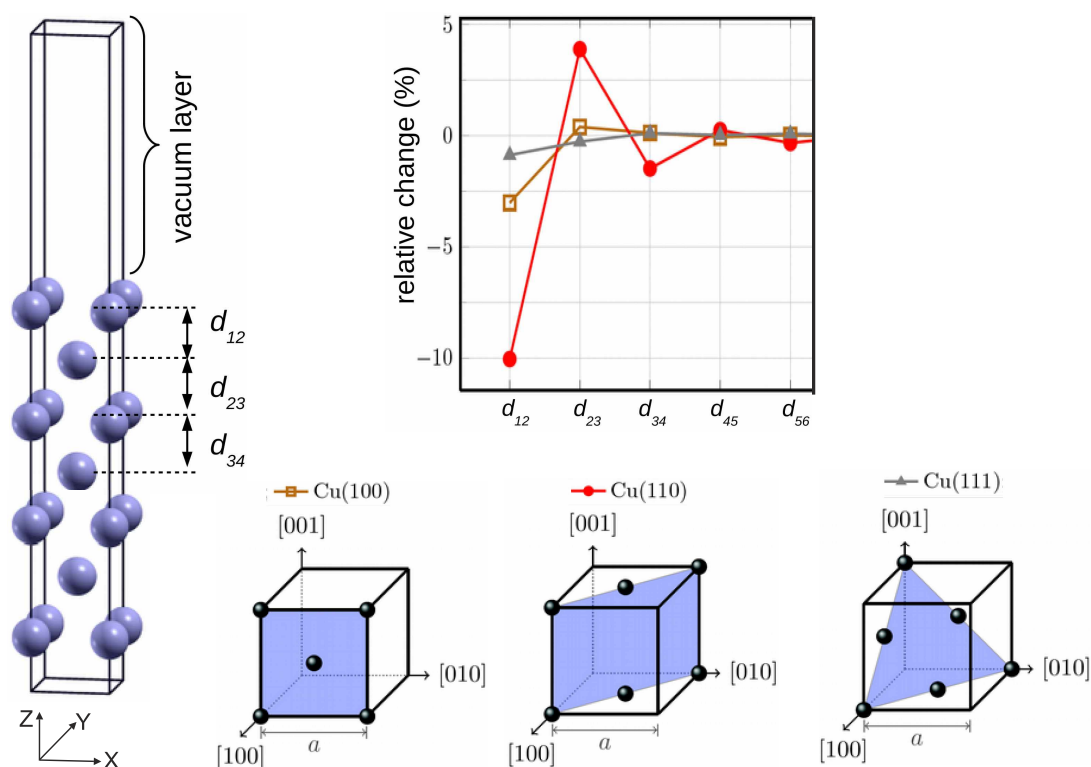


Рис. 4: Пример зависимости релаксации слоев для граней (100), (110) и (111) г.ц.к. металла. Адаптировано из книги Peter Puschnig "Fundamentals of Electronic Structure Theory".

Вопросы

Постройте в VMD три грани металла: (100), (110) и (111), полученные в результате оптимизации координат. Транслируйте суперячейку по трем векторам.

Сравните энергии в расчете на один атом для объемного кристалла и трех поверхностей. Атомам выгоднее находиться на поверхности или в объеме?

Какая грань самая выгодная?

Для всех граней постройте график зависимость изменения расстояния между слоями (по сравнению со значением в объеме) от номера слоя.

Как изменилось расстояние между слоями? Слои какой грани сильнее смещаются относительно положения в объеме и почему?

8 Молекула на поверхности металла

Задача: вычислить энергию адсорбции молекулы галогена на грани (100) металла. Энергия адсорбции (E_{ads}) молекулы в расчете на один атом:

$$E_{ads} = (E_{tot} - E_{slab} - E_{mol})/N,$$

где E_{tot} — полная энергия системы с молекулой на поверхности, E_{slab} — полная энергия поверхности без молекулы, E_{mol} — энергия молекулы в вакууме, N — число атомов в молекуле.

Из предыдущей лабораторной работы возьмите грань (100) металла. Перпендикулярно поверхности оставьте три слоя, вакуумный промежуток между слоями — 12 Å. Увеличьте ячейку поверхности до 2×2 . Один из способов: взять координаты атомов металла в ангстремах, вставить в файл GaussView вместе с трансляционной ячейкой (пример файла GVfile в папке asp/examples), транслировать (Crystal Editor → View → Cell replication 2×2 → Combine), выписать координаты и векторы трансляции в файл POSCAR. Второй способ — посчитать координаты вручную. Запустите расчет оптимизации поверхности в VASP (два нижних слоя металла в расчетах фиксировать, один верхний — релаксировать). К-точки: $2 \times 2 \times 1$. Выпишите значение полной энергии. Необходимо отметить, что предложенные параметры (3 слоя, ячейка 2×2 , сетка $2 \times 2 \times k$ -точек) не годятся для точного расчета энергии адсорбции, но подходят для учебных целей.

Оптимизируйте координаты молекулы галогена в вакууме, выпишите значение полной энергии.

Поместите молекулу (с оптимизированным расстоянием между атомами) горизонтально поверхности, на расстоянии 2.5 Å над верхним слоем грани (100) металла. Запустите оптимизацию задачи в VASP (атомы галогена тоже релаксируют). Выпишите значение полной энергии. Вычислите энергию адсорбции.

Рассчитайте энергию разрыва связи молекулы в вакууме.

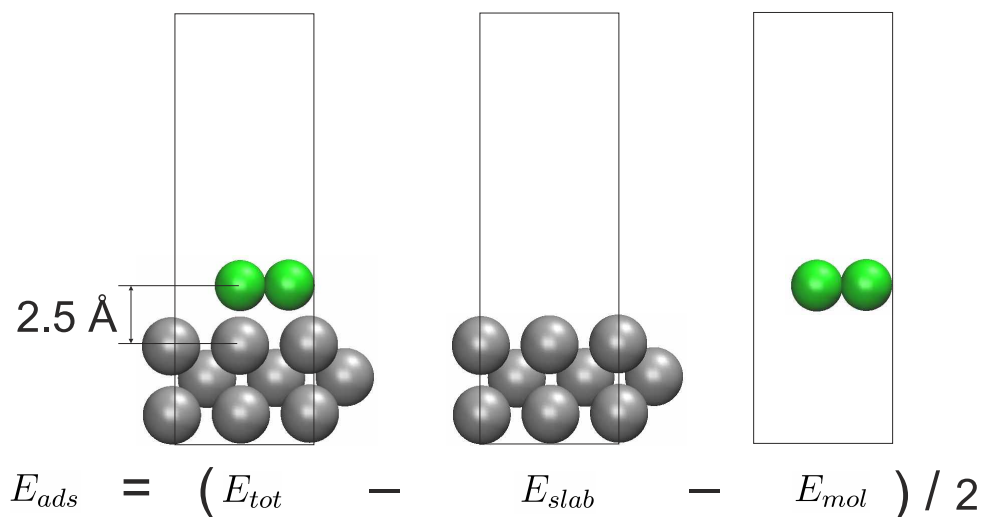


Рис. 5: Расчет энергии адсорбции для атома хлора на грани (100) металла. Показаны начальные структуры до оптимизации координат.

Вопросы

Молекуле галогена выгоднее находиться на поверхности или в вакууме?

Чему равна энергия, необходимая для разрыва молекулы на поверхности? Сравните ее с энергией разрыва молекулы в вакууме.

Чему равна энергия адсорбции молекулы?

В чем идея использования катализатора (металла)?

9 DOS полупроводника

Задача: построить плотность электронных состояний (density of states, DOS) для любого полупроводника.

Выберите любой полупроводник. Оптимизируйте его постоянную решетки. После этого запустите расчет с оптимизированной решеткой с увеличенным числом к-точек. Откройте файл DOSCAR. Нас интересует строка после названия системы, шестая сверху. В ней указывается: максимальная энергия (EMAX), минимальная энергия (EMIN), число значений энергии для которых рассчитаны состояния в данном диапазоне (NEDOS), энергия Ферми в эВ, 1.0000. Со следующей строки идут значения в три колонки, если расчеты проведены без учета спина: energy, DOS, integrated DOS. Если расчеты спин-поляризованные, будет пять колонок: energy, DOS(up), DOS(down), integrated DOS(up), integrated DOS(down).

По умолчанию NEDOS = 301. Для увеличения количества точек на графике можно увеличить NEDOS и ограничить EMAX и EMIN в файле INCAR:

NEDOS = 2001

EMAX = 10

EMIN = -7

В качестве примера на рис. 6 показан график DOS для кремния.

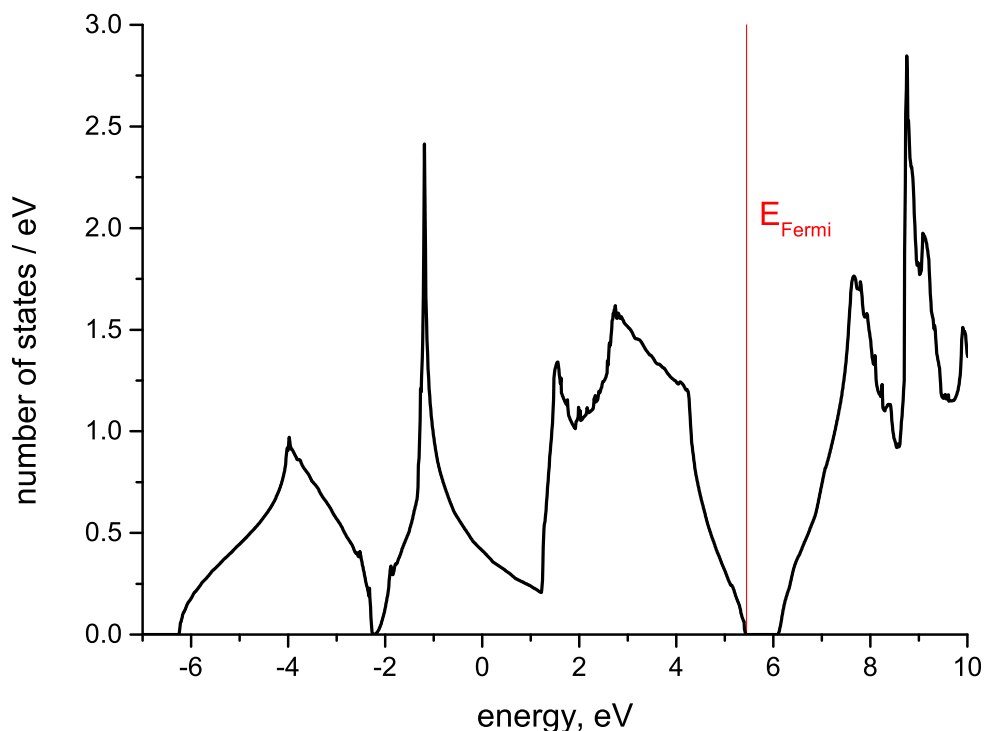


Рис. 6: Плотность электронных состояний кремния (решетка алмаза).

Вопросы

Постройте график DOS и отметьте на нем энергию Ферми.

Чему равна запрещенная зона? Сравните ее с экспериментальным значением. Почему они отличаются?

Дополнительные возможности, которые в обязательное задание не входят: можно рассчитать DOS для каждого конкретного атома и для каждого орбитального состояния каждого атома. Для этого в INCAR нужно поставить `LORBIT = 11`. Описание файла DOSCAR можно найти на сайте www.vasp.at/wiki/wiki/index.php/DOSCAR. Визуализировать DOSCAR рекомендуется в программах WXDragon (бывают ошибки) или p4vasp (есть проблемы с установкой). WXDragon можно скачать с сайта <http://wxdragon.de>, p4vasp есть на сервере в разделе `home/asp/prog`.

10 Анализ научной статьи

Задача: разобраться в научной публикации, результаты в которой частично или полностью получены методом теории функционала плотности (DFT). Студент выбирает не менее двух научных статей на английском языке из области его научных интересов или любой другой. Желательно выбрать статью, в которой кроме DFT расчетов есть экспериментальные данные. Студент показывает статьи преподавателю и они выбирают одну статью.

Студент изучает выбранную статью и делает короткий доклад с презентацией на 10–15 минут. Обязательные разделы доклада:

- Название, авторы статьи, выходные данные статьи (журнал, номер, год, страницы).
- Кратко о чем статья.
- Методы расчета (максимально подробно).
- Основные результаты расчетов и сопоставление с экспериментом (если есть).

Вопросы

Почему для решения данной задачи выбраны именно такие методы расчета?

Соответствуют ли выводы статьи использованной методике расчетов?

Какие Вы видите слабые места в расчетах?

11 Индивидуальный проект

Задача для расчетов будет дана каждому студенту отдельно, исходя из его научных интересов, выбранной статьи для доклада и с учетом возможности решения задачи за несколько занятий на небольшом сервере.

В течение нескольких занятий студент решает задачу, задает вопросы по задаче преподавателю. Цель — максимально полно использовать полученные в данном практикуме навыки расчета и рассчитать как можно больше характеристик.

Проект оформляется студентом в виде презентации. Доклад на 10–15 минут. Обязательные разделы:

- Название и исполнитель.
- Постановка задачи.
- Методы расчета (максимально подробно).
- Основные результаты с графиками и рисунками.
- Сопоставление с экспериментом (если есть).

Оцениваются:

- полученные результаты (количество и качество),
- понимание того что получено,
- понимание самого процесса расчета,
- качество доклада.