

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе и
образовательным инициативам

 О.Н. Злрок
« 4 » апреля 2020 г.

Регистрационный № УД-7665/уч.

*ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ФИЗИКЕ И ФИЗИЧЕСКОМ
ЭКСПЕРИМЕНТЕ*

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:**

1-31 80 20 Прикладная физика

Профилизация: Физическая информатика

2020 г.

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе и
образовательным инновациям

_____ О.Н.Здрок

« ___ » _____ 2020 г.

Регистрационный № УД- _____ /уч.

***ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ФИЗИКЕ И ФИЗИЧЕСКОМ
ЭКСПЕРИМЕНТЕ***

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:**

1-31 80 20 Прикладная физика

Профилизация: Физическая информатика

2020 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 80 20 -2019 и учебного плана № G-31-096/уч. от 11.04.2019 г.

СОСТАВИТЕЛИ:

А.В. Леонтьев, доцент кафедры физической электроники и нанотехнологий факультета радиофизики и компьютерных технологий Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент

РЕЦЕНЗЕНТЫ

Д.А.Котов, доцент кафедры микро- и наноэлектроники факультета радиотехники и электроники БГУИР, кандидат технических наук, доцент

В.В.Скакун, заведующий кафедрой анализа и компьютерного моделирования факультета радиофизики и компьютерных технологий Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой физической электроники и нанотехнологий Белорусского государственного университета
(протокол № 5 от 20.12. 2019 г.);

Научно-методическим Советом Белорусского государственного университета
(протокол № 3 от 03.01.2020 г).

Заведующий кафедрой физической
электроники нанотехнологий

В.М.Борздов

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цель учебной дисциплины – формирование у студентов систематизированных знаний и навыков в области моделирования физических процессов, технологий и приборов микро- и нанoeлектроники, планировании экспериментов и обработке полученных данных.

Задачи учебной дисциплины:

- ознакомиться численными методами, используемыми в физике твердого тела, оптики и физике полупроводников;
- получить теоретические навыки математического планирования натурального эксперимента;
- ознакомиться с численными методами, используемыми в микро- и нанoeлектронике;
- ознакомиться с современными пакетами прикладных программ моделирования технологических процессов и приборов в микроэлектронике.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием (магистра).

Учебная дисциплина является государственным компонентом и относится к модулю «Математические методы в физике».

Связи с другими учебными дисциплинами, включая учебные дисциплины компонента учреждения высшего образования, дисциплины специализации и др.

Материал курса опирается на сведения, полученные ранее при освоении учебных дисциплин компонента учреждения высшего образования: «Общая физика», «Математический анализ», «Физика полупроводников и полупроводниковых приборов», «Физика твердого тела», «Квантовая радиофизика».

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Вычислительные методы в физике и физическом эксперименте» должно обеспечить формирование следующих универсальных и углубленных профессиональных компетенций.

универсальные компетенции:

УК-3. Быть способным использовать фундаментальные математические знания для анализа, верификации, оценки полноты информации в ходе профессиональной деятельности, при необходимости выполнять и синтезировать недостающую информацию, работать в условиях неопределенности.

углубленные профессиональные компетенции:

УПК-6. Быть способным применять в профессиональной деятельности методы вычислительного эксперимента, квалифицированно проводить численные расчеты физических объектов и процессов.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- математический аппарат, используемый в вычислительном эксперименте в физике твердого тела, оптике и физике полупроводников ;
- математические методы, применяемые для моделирования технологий и приборов микроэлектроники;
- программное обеспечение для численного моделирования рассматриваемых в рамках дисциплины задач;

уметь:

- правильно выбрать необходимый математический аппарат для решения поставленных физических проблем в области физики твердого тела, оптики и физики полупроводников;
- применять математические методы для оптимизации технологических процессов в микроэлектронике;
- проводить математическую обработку результатов численного и натурального экспериментов ;

владеть:

- математическими методами планирования эксперимента;
- навыками работы с программными пакетами SRIM, MicroTec421 и др.;
- современными пакетами обработки результатов натурального и численного эксперимента.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 2 семестре. Всего на изучение учебной дисциплины «Вычислительные методы в физике и физическом эксперименте» отведено:

– для очной формы получения высшего образования – 108 часов, в том числе 48 аудиторных часов, из них: лекции – 28 часов, лабораторные занятия – 20 часов.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма текущей аттестации по учебной дисциплине – экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Тема 1 . Математические методы в физике и физическом эксперименте.

Введение. Информационные модели и компьютерные эксперименты в физике. Информационные модели в физике. Концепция компьютерного моделирования.

Тема 2. Компьютерное моделирование в физике твердого тела и физике полупроводников.

2.1. Моделирование многочастичных систем методом МК.

Основные понятия. Моделирование многочастичных систем методом Монте-Карло (МК). Статистические ансамбли. Моделирование диффузионных процессов.

2.2. Моделирование многочастичных систем методом молекулярной динамики (МД).

Уравнения движения. Силы и потенциалы взаимодействия. Области применения метода молекулярной динамики. Моделирование фазовых диаграмм двухкомпонентных систем. Диффузия в твердом теле. Особенности диффузии в кремнии.

Тема 3. Компьютерное моделирование в оптическом эксперименте.

3.1. Соотношение Крамерса-Кронига в физике и его применение в оптическом эксперименте.

Проблемы реализации соотношения Крамерса-Кронига в физике твердого тела и оптике. Программа KKST с использованием кубических сплайнов для расчета оптических функций полупроводниковых и диэлектрических материалов. Примеры расчетов.

3.2. Решение прямой и обратной задачи лазерной эллипсометрии

Лазерная и спектральная эллипсометрия. Прямая и обратная задачи. Схемы расчета, преимущества 4-х зонной схемы измерений. Многоугловые измерения. Модель расчетов. Программа ELLIPS для расчета параметров многослойных систем.

Тема 4. Моделирование взаимодействия заряженных частиц с веществом.

4.1. Кинетическое уравнение Больцмана.

Кинетическое (транспортное) уравнение Больцмана. Метод моментов. Функция распределения. Линейные и нелинейные каскады. Области применения.

4.2. Метод Монте-Карло.

Выбор физических моделей. Генератор случайных чисел. Каскадные расчеты. Атомное перемешивание в многослойных системах.

Тема 5. Численное моделирование физического распыления твердых тел.

5.1. Метод МД. Преимущества и недостатки метода.

Постановка задачи. Основные проблемы применения метода. Подготовка данных. Программа TRYDIN.

5.2. Метод МК, программы SRIM.

Особенности применения метода МК для расчета коэффициента физического распыления. Методика проведения расчетов с использованием пакета SRIM-2013. Сравнение расчетов с экспериментом.

Тема 6. Взаимодействие электронных пучков с твердым телом.

Постановка задачи, физические модели. Расчет коэффициента отражения. Генерация вторичных излучений. Применение метода МК. Основные получаемые результаты.

Тема 7. Постановка и решение граничных задач в микроэлектронике.

Граничные задачи в микроэлектронике. Примеры границ раздела в технологии ИС. Постановка задачи и выбор метода решения. Переход примеси через границу раздела. Граница раздела SiO₂-Si. Автолегирование при эпитаксии.

Тема 8. Математическое моделирование кинетики твердофазных реакций.

Понятие твердофазных реакций. Геометрические модели реакций. Модель синтеза сложного оксида. Модель осаждения поликристаллического кремния. Модель Дила-Гроувда для окисления кремния.

Тема 9. Моделирование оптических свойств гетерогенных сред.

Понятие и методы получения гетерогенных сред. Плазменные колебания. Уравнения Клаузиуса-Моссотти. Уравнение Максвелла-Гарнета. Среды с гигантским коэффициентом преломления.

Тема 10. Моделирование физических процессов в среде COMSOL Multiphysics.

COMSOL Multiphysics - универсальная среда численного моделирования систем, устройств и процессов во всех областях проектирования, производства и научных исследований. Структура пакета и базовые возможности.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Дневная форма получения образования

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов						Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное	Количество часов УСР	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Математические методы в физике и физическом эксперименте	2			-			Аудиторный опрос
2	Компьютерное моделирование в физике твердого тела и физике полупроводников.	4			-			Отчет по лабораторной работе. Презентации по рефератам
2.1.	Моделирование многочастичных систем методом МК.	2			-			Аудиторный опрос Презентации по рефератам.
2.2.	Моделирование многочастичных систем методом МД.	2			-			Аудиторный опрос Презентации по рефератам.
3.	Компьютерное моделирование в оптическом эксперименте.	4			4			Отчет по лабораторной работе. Презентации по рефератам.
3.1.	Соотношение Крамерса-Кронига в физике и его применение в оптическом эксперименте.	2			2			Отчет по лабораторной работе. Презентации по рефератам.
3.2.	Решение прямой и обратной задачи лазерной эллипсометрии	2			2			Отчет по лабораторной работе. Презентации по рефератам.
4	Моделирование взаимодействия заряженных частиц с веществом.	4			4			Презентации по рефератам

4.1.	Кинетическое уравнение Больцмана.	2			2		Аудиторный опрос
4.2.	Метод Монте-Карло.	2			2		Отчет по лабораторной работе.
5.	Численное моделирование физического распыления твердых тел.	4			2		Презентации по рефератам
5.1.	Метод МД. Преимущества и недостатки	2			-		Аудиторный опрос
5.2.	Метод МК, программы SRIM.	2			2		Отчет по лабораторной работе.
6.	Взаимодействие электронных пучков с твердым телом.	2			2		Аудиторный опрос. Презентации по рефератам
7.	Постановка и решение граничных задач в микроэлектронике.	2			2		Отчет по лабораторной работе. Презентации по рефератам.
8.	Математическое моделирование кинетики твердофазных реакций.	2			-		Аудиторный опрос. Презентации по рефератам
9.	Моделирование оптических свойств гетерогенных сред	2			2		Аудиторный опрос . Отчет по лабораторной работе.
10.	Моделирование физических процессов в среде COMSOL Multiphysics.	2			4		Отчет по лабораторной работе. Презентации по рефератам

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы

1. *Эвонарев С.В.* Основы математического моделирования/ Из-во Уральского ун-та. 2019. 112 с.
2. *Горлач Б.А.* Датчики Математическое моделирование. Построение моделей и численная реализация: Учебное пособие./ Горбач Б.А., Шахов В.Г.СПб.:Из-во Лань.2018 292 с.
3. *Коваленко А.В.* Математическое моделирование физико-химических процессов в среде Comsol Multiphysics 5.2.: Учебное пособие /Коваленко А.В., Узденкова А.М., Уртепов М.Х., Никоненко В.В.СПб.:Из-во Лань.2017. 228 с.
4. *Абрамов И.И.* Основы моделирования микро- и нанoeлектроники: монография/ Saarbrucken: LAP LAMBERT Academic Publishing. 2016. 434 с.
5. *Поршнев С.В.* Компьютерное моделирование физических систем с использованием пакета Mathcad: учебное пособие.Из-во. Телеком.2015. 320 с.
6. *Поршнев С.В.* Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB: учебное пособие.СПб. Из-во:Лань.2015.726с.
7. *Коткин Г.* Компьютерное моделирование физических процессов с использованием MATLAB: учебное пособие./Коткин Г., Попов Л., Черкасский В. Из-во: Юрайт.2019. 202с.
8. *Дорожкин Н.Н.* Компьютерное моделирование в физике твердого тела./ Н.Н.Дорожкин, Н.Г.Якутович. Минск. БГУ.2010. 107с.

Перечень дополнительной литературы

1. *Зи, С.* Технология СБИС / С. Зи. М.: Мир. Т.2.1986.453 с.
2. Взаимодействие заряженных частиц с твердым телом. Труды школы НАТО. М.: Высш. Школа, 1994. 546с.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой оценки

Итоговая оценка формируется в соответствии со следующими документами:

1. «Об утверждении правил проведения аттестации студентов, курсантов, слушателей при освоении содержания образовательных программ высшего образования». Постановление Министерства образования Республики Беларусь от 29 мая 2012 г. № 53.

2. «Положение о рейтинговой системе оценки знаний по дисциплине в Белорусском государственном университете». Приказ ректора БГУ от 18.08.2015 № 382-ОД.

3. «Критерии оценки знаний и компетенций студентов по десятибалльной шкале». Письмо Министерства образования Республики Беларусь №09-10/53-ПО от 28.05.2013г.

Формой текущей аттестации по дисциплине учебным планом предусмотрен зачет.

При формировании итоговой оценки используется рейтинговая оценка знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая оценка предусматривает использование весовых коэффициентов для текущего контроля знаний и текущей аттестации студентов по дисциплине.

Для текущего контроля качества усвоения знаний по дисциплине рекомендуется опрос по материалам лекций, защита лабораторных работ, защита реферативных работ, устные вопросы и обмен мнениями, идеями по отдельным темам (метод учебной дискуссии).

Оценка за ответы на лекциях (опрос) включает в себя полноту ответа, наличие аргументов, примеров из практики, участие в дискуссии и т.д.

Контроль выполнения лабораторных работ осуществляется путем рассмотрения отчета по каждой выполненной лабораторной работе.

Защита реферативных работ проводится в форме индивидуальных выступлений-презентаций с последующей дискуссией.

Формирование оценки за текущую успеваемость:

- ответы на лекциях (опрос) – 20 %;
- выполнение лабораторных работ – 40 %;
- презентация по реферату – 40 %.

Рейтинговая оценка по дисциплине рассчитывается на основе оценки текущей успеваемости и экзаменационной оценки с учетом их весовых коэффициентов. Вес оценки по текущей успеваемости составляет 60%, экзаменационной оценки – 40 %.

Примерный перечень лабораторных занятий

1. Термическое окисление кремния и эллипсометрический контроль толщины по четырехзонной схеме измерения.
2. Многоугольная эллипсометрия по четырехзонной схеме измерения. Программный комплекс ELLIPS MOD.
3. Моделирование основных технологических процессов изготовления интегральных схем с помощью программного комплекса ICESCREA
4. Моделирование задач ионно-лучевой литографии методом Монте-

- Карло с помощью пакета программ CASINO.
5. Моделирование методом Монте-Карло задач ионно-лучевого перемешивания в двухслойных системах.
 6. Моделирование методом Монте-Карло физического распыления многокомпонентных систем.
 7. Использование пакета программ SRIM-2013 для моделирования каскадов ион-атомных столкновений.
 8. Машинное моделирование процесса рассеяния заряженных частиц в СЦМ.
 9. Моделирование технологических операций производства ИС с помощью программного комплекса SUPREM III.
 10. Двумерное моделирование технологий и приборов с помощью программного комплекса MICROTEC 421.
 11. Расчет оптических функций полупроводников по соотношению Крамерса-Кронига. Программный комплекс KKST.

**Описание инновационных подходов и методов к преподаванию
учебной дисциплины (эвристический, проективный,
практико-ориентированный)**

При организации образовательного процесса используется *практико-ориентированный подход*, который предполагает:

- освоение содержание образования через решения практических задач;
- приобретение навыков эффективного выполнения разных видов профессиональной деятельности;
- ориентацию на генерирование идей, реализацию групповых студенческих проектов, развитие предпринимательской культуры;
- использованию процедур, способов оценивания, фиксирующих сформированность профессиональных компетенций.

**Методические рекомендации по организации самостоятельной работы
обучающихся, кроме подготовки к экзамену, подготовка к зачету**

При изучении учебной дисциплины рекомендуется использовать следующие формы самостоятельной работы: – поиск (подбор) и обзор литературы и электронных источников по индивидуально заданной проблеме курса.

Реферат должен содержать следующие обязательные разделы:

- постановка задачи или проблемы и пути ее решения;
- историю исследования со ссылками на литературные источники;
- современное состояние проблемы;

- **ВЫВОДЫ.**

По содержанию реферата должна быть

- подготовлена презентация для публичной защиты;
- подготовлены вопросы к аудитории по представленному материалу для выяснения усвоения основных положений доклада.

Примерные темы реферативных работ

1. Прямая и обратная задачи лазерной эллипсометрии.
2. Соотношение Крамерса-Кронига в физике.
3. Основные проблемы практического применения метода МД.
4. Классические области применения метода МК в физике..
5. Неизотермическая диффузия. Постановка задачи, методы решения.
6. Моделирование физического распыления. Соотношение теории и эксперимента.
7. Применение метода МК для моделирования взаимодействия электронов с веществом. Выбор физических моделей.
8. Методы расчета угла рассеяния заряженных частиц в системе центра масс.
9. Основные направления модернизации SRIM-алгоритма..
10. Возможности программного пакета Comsol Multiphysics.

Список компьютерных программ

1. MicroThech 421
2. Онлайн калькуляторы расчета TC(<https://rcl-radio.ru/?p=20499>) и Термопар (<https://rcl-radio.ru/?p=20577>)
3. SRIM – 2013
4. ICECREAM
5. ELLIPS MOD
6. Comsol Multiphysics
7. ORIGIN

Выполнение лабораторных работ

В лабораторном практикуме по дисциплине «Вычислительные методы в физике и физическом эксперименте» запланировано проведение натуральных и численных экспериментов по изучению параметров сенсорных систем. Задание по лабораторным работам для студентов заключается в подготовке отчета в письменном виде по выполненной работе. Контроль выполнения лабораторных работ будет осуществляться путем рассмотрения отчета по

каждой выполненной лабораторной работе. Отчет по лабораторной работе должен содержать:

1. Фамилию, имя, отчество студента, номер группы.
2. Название работы.
3. Цель исследования.
4. Исходные данные и методику проведения лабораторной работы.
5. Название выполняемого пункта задания.
6. Блок-схему исследования (где это применимо) с необходимыми пояснениями.
7. Таблицы рассчитанных и экспериментальных зависимостей в виде удобном для анализа.
8. Графические зависимости рассчитанных и экспериментальных данных с нанесенными точками и выполненные на одном рисунке для каждого случая.
9. Обсуждение полученных результатов, оценки величин и зависимостей, выводы по работе.

Защита отчетов по лабораторной работе студентам будет проводиться в форме индивидуального собеседования и тестирования.

Примерный перечень вопросов к экзамену

1. Прямая и обратная задачи лазерной эллипсометрии. Методы решения.
2. Моделирование многочастичных систем методом Монте-Карло.
3. Моделирование многочастичных систем методом молекулярной динамики.
4. Соотношение Крамерса-Кронига и его роль в физике.
5. Четырех-зонная схема измерений в лазерной эллипсометрии.
6. Методы расчета угла рассеяния заряженных частиц в системе ЦМ.
7. Потенциалы ион-атомного взаимодействия. Функция экранирования.
8. Математическое описание диффузии примеси в кремнии.
9. Кинетика твердофазных реакций. Геометрические модели. Реакция синтеза сложного оксида.
10. Кинетика окисления кремния.
11. Постановка и решение граничных задач в микроэлектронике. Граница SiO_2 -Si.
12. Численное моделирование эпитаксии. Автолегирование при эпитаксии.
13. Взаимодействие электронов с твердым телом. Выбор физических моделей.
14. Физическое распыление твердых тел. Сравнение результатов расчета по методу МД и МК.

15. Численное моделирование атомного перемешивания в многослойных системах.
16. Интегро-дифференциальное уравнение Больцмана. Области применения.
17. Пакет COMSOL Multiphysics. Структура и решаемые задачи.
18. Моделирование оптических свойств гетерогенных структур.
19. Численное моделирование электронной литографии.
20. Каскады атомных столкновений. Линейные и нелинейные каскады.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
1. Методы математического моделирования физических процессов	Кафедра анализа и компьютерного моделирования		Прот. № 5 от 20.12.2019 г.)

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ ПО
ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 202_ г.)

Заведующий кафедрой

В.М.Борздов

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета

С.В.Малый
