Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе и
образовательным инновациям
_____ О.Г. Прохоренко

21 декабря 2023 г.
Регистрационный № УД – 12873/уч.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСИСТЕМ

Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности

1-31 03 03 **Прикладная математика (по направлениям)**

направление специальности
1-31 03 03-01 Прикладная математика (научно-производственная деятельность)

2023 г.

Учебная программа составлена на основе образовательного стандарта высшего образования I ступени ОСВО 1-31 03 03-2021 по специальности 1-31 03 03 Прикладная математика (по направлениям) и учебного плана №G31-1-030/уч. от 30.06.2021.

СОСТАВИТЕЛИ:
Л.Ф. Макаренко, доцент кафедры вычислительной математики Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент

Е.А. Левчук, старший преподаватель кафедры вычислительной математики Белорусского государственного университета

РЕЦЕНЗЕНТ:
Н.Н. Васильев, ведущий инженер ООО “Лотис ТИИ”, кандидат физико-математических наук

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:
Кафедрой вычислительной математики Белорусского государственного университета
(протокол № 5 от 05.12.2023);

Советом факультета прикладной математики и информатики Белорусского государственного университета
(протокол № 4 от 19.12.2023)

Заведующий кафедрой
вычислительной математики _____ В.И. Репников

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

Цель учебной дисциплины «Компьютерное моделирование наносистем» – формирование у студентов навыков исследования наносистем с использованием методов вычислительного эксперимента.

В рамках поставленной цели **задачи** учебной дисциплины состоят в следующем:

– обучение основам квантовой механики;

– ознакомление с дифференциальными задачами, используемыми при моделировании наноразмерных структур;

– обучение студентов основным приближенным методам решения задач моделирования наноразмерных систем;

– обучение студентов использованию языка Python для научных расчетов и его использованию для квантово-механического моделирования наноэлектронных структур.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием: учебная дисциплина «Компьютерное моделирование наносистем» относится **к циклу** дисциплин специализации (1-31 03 03-01 11 математическая кибернетика) компонента учреждения высшего образования.

Связи с другими учебными дисциплинами. Основой для изучения данной дисциплины являются такие дисциплины как: "Дифференциальные уравнения", "Основы математического моделирования электромагнитных полей", "Компьютерное моделирование. Вводный курс". Учебная дисциплина связана с дисциплинами "Уравнения математической физики", "Численные методы".

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины "Компьютерное моделирование наносистем" должно обеспечить формирование следующих компетенций:

универсальные компетенции:

УК-1. Владеть основами исследовательской деятельности, осуществлять поиск, анализ и синтез информации.

УК-2. Решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе применения информационно-коммуникационных технологий.

базовые профессиональные компетенции:

БПК-6. Разрабатывать метод математического моделирования для решения задач в различных предметных областях, применять основные уравнения теоретической механики, математической физики для моделирования физических процессов, реализовывать на современных языках программирования построенные алгоритмы.

БПК-7. Составлять математические модели типовых профессиональных задач, находить и обосновывать выбор оптимального

метода решения, интерпретировать смысл полученного математического результата.

БПК-9. Использовать принципы численных методов и навыки прикладного численного моделирования для решения основных задач высшей математики и математической физики, выбирать оптимальный алгоритм для решения конкретных задач.

специализированные компетенции:

СК-3. Решать задачи дифференциального и интегрального исчисления, использовать методы дифференциального исчисления при построении и исследовании математических моделей естественнонаучных процессов.

СК-7. Проводить вычислительный эксперимент при решении задач прикладной математики, обрабатывать экспериментальные данные, применять современный инструментарий визуализации данных с использованием современных новейших программных технологий.

В результате изучения дисциплины студент должен:

знать:

– основные математические модели, используемые для квантово-механического описания физических явлений;

– основные методы приближенного и численного решения дифференциальных задач, возникающих при моделировании наноразмерных структур;

уметь:

– реализовывать численные методы моделирования квантово-механических систем;

– применять вычислительный эксперимент для исследования наноразмерных структур;

владеть:

– практическими навыками научного программирования на языке Python;

– навыками использования языка программирования Python для компьютерного моделирования физических процессов и анализа данных.

Структура учебной дисциплины.

Дисциплина изучается в 6 семестре очной формы получения высшего образования. Всего на изучение учебной дисциплины «Компьютерное моделирование наносистем» отведено:

– для очной формы получения высшего образования – 108 часов, в том числе 64 аудиторных часа: лекции – 32 часа, лабораторные занятия – 30 часов, управляемая самостоятельная работа – 2 ч (ДОТ).

Трудоемкость учебной дисциплины – 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации – зачет.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Раздел 1. Некоторые физические принципы, математическое введение и программное обеспечение моделирования квантовомеханических систем

Тема 1.1 Математический аппарат квантовой механики

Линейные операторы. Собственные значения и собственные функции линейных операторов. Эрмитовы операторы. Обобщенные функции, дельта-функция Дирака.

Тема 1.2. Библиотеки языка Python для научных вычислений

Библиотека SciPy. Специальные функции. Методы численного интегрирования и приближенного решения задач для обыкновенных дифференциальных уравнений. Библиотека scipy.linalg. Библиотека scipy.sparse. Типы разреженных матриц и методы работы с ними. Библиотека символьных вычислений SymPy.

Тема 1.3. Задачи вариационного исчисления

Вариационный принцип. Численные методы оптимизации. Методы одномерной численной оптимизации. Методы дихотомии, "золотого сечения", Ньютона. Методы многомерной численной оптимизации. Методы Нелдера-Мида, Хука-Дживса, градиентные методы, методы Ньютона-Рафсона, Марквардта.

Тема 1.4. Некоторые сведения из классической механики

Вариационные принципы классической механики. Функции Лагранжа и Гамильтона. Уравнение Лагранжа.

Раздел 2. Введение в квантовую механику

Тема 2.1. Волновая теория вещества

Корпускулярно-волновой дуализм, гипотеза де Бройля. Волновая функция состояния системы. Физический смысл волновой функции. Волновой пакет.

Тема 2.2. Стационарное уравнение Шредингера

Использование принципа соответствия для вывода уравнения для волновой функции. Оператор Гамильтона и его свойства. Стационарное уравнение Шредингера.

Тема 2.3. Применение уравнения Шредингера для изучения свойств наносистем

Одномерные задачи квантовой механики. Бесконечная потенциальная яма. Конечная потенциальная яма. Конечный потенциальный барьер. Гармонический осциллятор.

Раздел 3. Основные положения и задачи квантовой механики

Тема 3.1. Постулаты квантовой механики и ее формализм

Формулировка постулатов квантовой механики. Квантовомеханические операторы. Оператор момента импульса. Среднее значение физической величины. Общие правила составления уравнения Шредингера. Нестационарное уравнение Шредингера.

Тема 3.2. Теория атома водорода

Частица в сферически симметричном потенциальном поле. Атом водорода. Сферические волновые функции атома водорода. Радиальные волновые функции атома водорода. Некоторые свойства волновых функций атома водорода.

Раздел 4. Приближенные методы квантовой механики

Тема 4.1. Вариационный метод

Вариационный метод Ритца. Вариационная форма задачи на собственные значения. Решение задач для стационарного уравнения Шредингера с помощью вариационного метода Ритца.

Введение в метод конечных элементов. Использование метода конечных элементов для решения задач на собственные значения. Использование библиотеки FEniCS при решении задач для стационарного уравнения Шредингера с помощью метода конечных элементов.

Вариационный метод для многоэлектронных систем. Адиабатическое приближение. Метод молекулярных орбиталей. Оператор спина.

Тема 4.2. Теория возмущений

Общие принципы теории возмущений. Стационарная теория возмущений. Нестационарная теория возмущений.

Тема 4.3. Моделирование низкоразмерных систем

Основные виды простейших полупроводниковых наноструктур. Квантовые ямы, нити, точки. Постановка задачи для стационарного уравнение Шредингера при моделировании одноэлектронных состояний в квантовых ямах, нитях, точках. Свойства полупроводниковых наноструктур.

Применение метода конечных разностей для решения задач на собственные значения. Решение задач для одномерного стационарного уравнения Шредингера с помощью метода конечных разностей. Метод конечных разностей для уравнения Шредингера с разрывными коэффициентами. Моделирование свойств полупроводниковых наноструктур с помощью метода конечных разностей.

Тема 4.4. Моделирование элементов квантовых компьютеров

Основные принципы квантовых вычислений. Суперпозиция. Запутанность. Принцип измерения. Кубит и его возможные реализации. Реализация двухкубитных операций. Обменное взаимодействие.

Методы расчета состояний многоэлектронных систем. Теория функционала плотности. Алгоритм метода Хартри-Фока для расчета состояний многоэлектронных систем и его модификации. Реализация метода Хартри-Фока на основе вариационного метода. Методы расчета

самосогласованного поля. Использование метода Хартри-Фока для расчета обменного взаимодействия системы кубитов.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная форма получения высшего образования с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские (практические) занятия	Лабораторные занятия	Количество часов УСР	
1	2	3	4	5	6	7	8
1	**Некоторые физические принципы, математическое введение и программное обеспечение моделирования квантовомеханических систем**						
1.1	Математический аппарат квантовой механики	2					Экспресс-опрос
1.2	Библиотеки языка Python для научных вычислений				8		Отчет по лабораторной работе
1.3	Задачи вариационного исчисления	2			6		Экспресс-опрос, отчет по лабораторной работе
1.4	Некоторые сведения из классической механики	2					Экспресс-опрос
2	**Введение в квантовую механику**						
2.1	Волновая теория вещества	2					Экспресс-опрос
2.2	Стационарное уравнение Шредингера	2					Экспресс-опрос
2.3	Применение уравнения Шредингера для изучения свойств наносистем	2			2		Контрольная работа по разделу 2
3	**Основные положения и задачи квантовой механики**						
3.1	Постулаты квантовой механики и ее	4			4		Экспресс-опрос, отчет по

	формализм						лабораторной работе
3.2	Теория атома водорода	4					Экспресс-опрос
4	**Приближенные методы квантовой механики**						
4.1	Вариационный метод	2			2	2 (ДОТ)	Отчет по лабораторной работе
4.2	Теория возмущений	4					Экспресс-опрос
4.3	Моделирование низкоразмерных систем	2			4		Экспресс-опрос, отчет по лабораторной работе
4.4	Моделирование элементов квантовых компьютеров	4			4		Контрольная работа по разделу 4
	Всего	**32**			**30**	**2**	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы

1. Драгунов, В.П. Наноэлектроника. Учебное пособие для вузов : в 2 ч. / В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. – 3-е изд., испр. и доп. – М.: Издательство Юрайт, 2022–2023. – 2 ч.
2. Попов, А.М. Вычислительные нанотехнологии: учебное пособие / А.М. Попов. – М.: КНОРУС, 2017. – 312 с.
3. Ибрагимов, И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем: учебное пособие / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. – СПб.: Издательство "Лань", 2020. – 384 с.
4. Вабищевич, П.Н. Численные методы. Вычислительный практикум / П.Н. Вабищевич. – М.: Либроком, 2010. – 320 с.
5. Хилл, К. Научное программирование на Python / К. Хилл. – М.: ДМК Пресс, 2021. – 646 с.

Перечень дополнительной литературы

6. Сергеев, Н.А. Физика наносистем: монография / Н.А. Сергеев, Д.С. Рябушкин. – М.: Логос, 2015. – 192 с.
7. Лутц, М. Изучаем Python : в 2 т. / М. Лутц. – 5-е изд. – СПб.: ООО "Диалектика", 2019–2020. – 2 т.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Для текущего контроля качества усвоения знаний студентами используется следующий диагностический инструментарий:

– отчеты по лабораторным работам;

– письменные контрольные работы;

– устные экспресс-опросы.

Лабораторные работы, как правило, представляют собой задания, включающие постановку дифференциальной задачи, описывающей заданную физическую систему, а также программную реализацию указанного численного метода на языке программирования Python, проведение вычислительного эксперимента и комментарии по его итогам. Рекомендуемая форма отчетности по лабораторной работе – отчет, выполненный в среде Jupyter. Лабораторная работа оценивается по стандартной 10-балльной шкале. Оценка за лабораторную работу может быть снижена в случае несвоевременного выполнения.

Письменные контрольные работы проводятся для контроля знаний по одному или нескольким разделам дисциплины. Они включают 4–5 заданий и

оцениваются по 10-балльной шкале. В случае неудовлетворительной оценки контрольная работа может быть переписана.

Устный экспресс-опрос студентов проводится в свободной форме в течение лабораторных и лекционных занятий. Его результаты учитываются преподавателем при выставлении рейтинговой оценки в конце семестра.

Формой промежуточной аттестации по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем» учебным планом предусмотрен **зачет.**

Используется рейтинговая система оценки знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая система предусматривает использование весовых коэффициентов в ходе проведения контрольных мероприятий текущей аттестации.

Примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущей аттестации в отметку при прохождении промежуточной аттестации:

– отчеты по лабораторным работам – 60 %;

– контрольные работы – 30 %;

– устный экспресс-опрос – 10 %.

Итоговая отметка по дисциплине рассчитывается на основе отметки текущей аттестации (рейтинговой системы оценки знаний) – 40% и отметки на зачете – 60%.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

Тема 4.1. Вариационный метод

Задание 1. Решение одномерного стационарного уравнения Шредингера с помощью вариационного метод (2 ч/ДОТ)

1. Решить задачу для стационарного уравнения Шредингера с помощью вариационного метода, используя указанные в варианте пробные функции.

2. Сравнить энергии основного состояния, полученные с помощью разных пробных функций. Указать, какие функции дают более точный результат.

3. Для одной из пробных функций построить графики волновых функций основного, первого и второго возбужденных состояний.

Форма контроля – отчет по лабораторной работе.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

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

- освоение содержания образования через решения практических задач;
- приобретение навыков эффективного выполнения разных видов профессиональной деятельности.

Также при организации образовательного процесса используется ***метод группового обучения***, который представляет собой форму организации учебно-познавательной деятельности обучающихся, предполагающую функционирование разных типов малых групп, работающих как над общими, так и специфическими учебными заданиями.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

Для организации самостоятельной работы студентов по учебной дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем» следует использовать современные информационные технологии: разместить в сетевом доступе комплекс учебных и учебно-методических материалов (учебно-программные материалы, методические указания к лабораторным занятиям, материалы текущего контроля и промежуточной аттестации, позволяющие определить соответствие учебной деятельности обучающихся требованиям образовательного стандарта высшего образования и учебно-программной документации, в т.ч. вопросы для подготовки к зачету, список рекомендуемой литературы, информационных ресурсов и др.). Эффективность самостоятельной работы студентов проверяется в ходе текущего и итогового контроля знаний. Для общей оценки качества усвоения студентами учебного материала рекомендуется использование рейтинговой системы.

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Библиотека SciPy. Специальные функции. Методы численного интегрирования и приближенного решения задач для обыкновенных дифференциальных уравнений.
2. Типы разреженных матриц и методы работы с ними в библиотеке SciPy.
3. Методы одномерной численной оптимизации. Методы дихотомии, "золотого сечения", Ньютона.
4. Методы многомерной численной оптимизации. Методы Нелдера-Мида, Хука-Дживса, наискорейшего спуска.

5. Квантовомеханические операторы. Оператор момента импульса.
6. Волновая функция состояния системы. Физический смысл волновой функции. Волновой пакет.
7. Одномерные задачи квантовой механики. Бесконечная потенциальная яма. Конечная потенциальная яма. Конечный потенциальный барьер.
8. Частица в сферически симметричном потенциальном поле.
9. Атом водорода. Сферические волновые функции атома водорода.
10. Атом водорода. Радиальные волновые функции атома водорода. Некоторые свойства волновых функций атома водорода.
11. Вариационный метод Ритца. Вариационная форма задачи на собственные значения.
12. Использование метода конечных элементов для расчета энергетического спектра электрона в наноразмерных структурах.
13. Использование метода конечных разностей для расчета энергетического спектра электрона в наноразмерных структурах.
14. Алгоритм метода Хартри-Фока и его модификации.
15. Общие принципы теории возмущений. Стационарная теория возмущений.
16. Нестационарная теория возмущений.
17. Основные виды простейших полупроводниковых наноструктур. Квантовые ямы, нити, точки.
18. Постановка задач для стационарного уравнение Шредингера при моделировании одноэлектронных состояний в квантовых ямах, нитях, точках.
19. Основные принципы квантовых вычислений. Суперпозиция. Запутанность. Принцип измерения.
20. Кубит и его возможные реализации.
21. Реализация двухкубитных операций. Обменное взаимодействие.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы по изучаемой учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
1. Уравнения математической физики	Кафедра компьютерных технологий и систем	Нет предложений	Изменений не требуется (протокол № 5 от 05.12.2023)
2. Численные методы	Кафедра вычислительной математики	Нет предложений	Изменений не требуется (протокол № 5 от 05.12.2023)

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 вычислительной математики (протокол №___ от _____)

Заведующий кафедрой

доцент, канд. ф.-м. н. _____ *В.И. Репников*

(степень, звание) (подпись) (И.О.Фамилия)

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета

доцент, канд. ф.-м. н. _____ *Ю.Л. Орлович*

(степень, звание) (подпись) (И.О.Фамилия)