

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Ректор Белорусского
Государственного университета

А.Д.Король

23 мая 2025 г.

Регистрационный № 3073/б.



КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСИСТЕМ

Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для
специальности:

6-05-0533-09 Прикладная математика

Профилизация: Математическое моделирование и управление

2025 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 6-05-0533-09-2023, учебного плана № 6-5.3-57/03 от 15.05.2023

СОСТАВИТЕЛИ:

Л.Ф.Макаренко, доцент кафедры вычислительной математики факультета прикладной математики и информатики Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент.

Е.А.Левчук, старший преподаватель кафедры вычислительной математики факультета прикладной математики и информатики Белорусского государственного университета.

РЕЦЕНЗЕНТ:

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

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой вычислительной математики БГУ
(протокол № 13 от 15.05.2025)

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 10 от 22.05.2025)

Заведующий кафедрой _____



В.И.Репников

 

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

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

Задачи учебной дисциплины:

1. Обучение основам квантовой механики;
2. Ознакомление с дифференциальными задачами, используемыми при моделировании наноразмерных структур;
3. Обучение студентов основным приближенным методам решения задач моделирования наноразмерных систем;
4. Обучение студентов использованию языка Python для научных расчетов и его использованию для квантово-механического моделирования нанoeлектронных структур.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием.

Учебная дисциплина относится к дисциплинам профилизации компонента учреждения образования.

Связи с другими учебными дисциплинами. Основой для изучения данной дисциплины являются такие дисциплины как: "Математический анализ", "Дифференциальные уравнения". Учебная дисциплина связана с дисциплинами "Уравнения математической физики", "Вычислительные методы алгебры".

Требования к компетенциям

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

Универсальные компетенции:

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

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

Базовые профессиональные компетенции:

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.

Составлять математические модели типовых профессиональных задач, находить и обосновывать выбор оптимального метода решения, интерпретировать смысл полученного математического результата.

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:

Использовать технологии вычислительного эксперимента для исследования квантово-механических систем.

В результате освоения учебной 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;

иметь навык:

- научного программирования на языке Python;
- использования языка программирования Python для компьютерного моделирования физических процессов и анализа данных.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 5 семестре. В соответствии с учебным планом всего на изучение учебной дисциплины «Компьютерное моделирование наносистем» отведено для **очной формы** получения высшего образования – 108 часов, в том числе 68 аудиторных часов: лекции – 34 часа, лабораторные занятия – 34 часа. **Из них:**

Лекции – 34 часа, лабораторные занятия – 30 часов, управляемая самостоятельная работа (УСР) – 4 часа.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации – зачёт.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Раздел 1. Некоторые физические принципы, математическое введение и программное обеспечение моделирования квантово-механических систем

Тема 1.1. Использование языка программирования Python для решения задач математического моделирования

Типы данных и синтаксические особенности языка Python. Функциональное программирование в Python. Использование и создание модулей. Работа с файлами. Библиотека Numpy. Объект array, операции над массивами. Функции векторной и матричной алгебры. Математические функции. Функции для работы с многочленами. Библиотека Matplotlib. Функции построения двумерных и трехмерных графиков в Python. Библиотека Scipy. Специальные функции. Численное интегрирование. Методы численной оптимизации. Библиотека scipy.linalg. Библиотека scipy.sparse. Типы разреженных матриц и методы работы с ними.

Тема 1.2. Некоторые сведения из классической физики

Элементы вариационного исчисления. Вариационные принципы классической механики. Функции Лагранжа и Гамильтона. Уравнение Лагранжа. Дифференциальные операторы в криволинейных системах координат. Уравнения Максвелла. Основные законы электромагнетизма.

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 Шрёдингера

Использование принципа соответствия для вывода уравнения для волновой функции. Оператор Гамильтона и его свойства. Стационарное уравнение Шрёдингера. Применение уравнения Шрёдингера для изучения свойств наносистем. Одномерные задачи квантовой механики. Бесконечная потенциальная яма. Конечная потенциальная яма. Конечный потенциальный барьер. Гармонический осциллятор. Численные методы решения краевых задач, их применение к решению стационарного уравнения Шрёдингера.

Тема 2.3. Постулаты квантовой механики и её формализм

Математический аппарат квантовой механики. Линейные операторы. Собственные значения и собственные функции линейных операторов. Эрмитовы операторы. Обобщенные функции, дельта-функция Дирака. Формулировка постулатов квантовой механики. Квантово-механические операторы. Оператор момента импульса. Среднее значение физической величины. Общие правила составления уравнения Шрёдингера. Нестационарное уравнение Шрёдингера.

Тема 2.4. 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 3. Приближённые методы квантовой механики

Тема 3.1. Вариационный метод

Вариационный метод Ритца. Вариационная форма задачи на собственные значения. Решение задач для стационарного уравнения Шредингера с помощью вариационного метода Ритца. Численные методы минимизации. Введение в метод конечных элементов. Использование метода конечных элементов для решения задач на собственные значения. Вариационный метод для двухэлектронных систем. Адиабатическое приближение. Метод молекулярных орбиталей. Оператор спина.

Тема 3.2. Теория возмущений

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

Тема 3.3. Моделирование низкоразмерных систем

Основные виды простейших полупроводниковых наноструктур. Квантовые ямы, нити, точки. Постановка задачи для стационарного уравнения Шредингера при моделировании одноэлектронных состояний в квантовых ямах, нитях, точках. Свойства полупроводниковых наноструктур. Расчет стационарных электрических полей в полупроводниковых наноструктурах. Применение метода конечных разностей для решения задач на собственные значения. Решение задач для одномерного стационарного уравнения Шредингера с помощью метода конечных разностей. Моделирование свойств полупроводниковых наноструктур с помощью метода конечных разностей.

Тема 3.4. 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 (дневная) форма получения высшего образования с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Некоторые физические принципы, математическое введение и программное обеспечение моделирования квантовомеханических систем							
1.1	Использование языка программирования Python для решения задач математического моделирования				8			Отчеты по лабораторным работам
1.2	Некоторые сведения из классической физики	6			2			Экспресс-опрос
2	Введение в квантовую механику							
2.1	Волновая теория вещества	2						Экспресс-опрос
2.2	Стационарное уравнение Шрёдингера	4			6			Отчет по лабораторной работе, контрольная работа по темам 1.2, 2.1, 2.2
2.3	Постулаты квантовой механики и её формализм	4			4			Отчет по лабораторной работе

2.4	Теория атома водорода	4						Экспресс-опрос
3	Приближённые методы квантовой механики							
3.1	Вариационный метод	4			2		2	Отчет по лабораторной работе
3.2	Теория возмущений	2			4			Экспресс-опрос, контрольная работа по темам 2.3, 2.4, 3.1, 3.2
3.3	Моделирование низкоразмерных систем	4			2		2	Отчет по лабораторной работе
3.4	Моделирование элементов квантовых компьютеров	4			2			Экспресс-опрос
	Всего	34			30		4	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. Демидович, Б. П. Математические основы квантовой механики : учебное пособие / Б. П. Демидович. - Изд. 3-е, стер. - Санкт-Петербург ; Москва ; Краснодар : Лань, 2022. - 197 с. - URL: <https://e.lanbook.com/book/184056>.
2. Львовский, А. Отличная квантовая механика : [в 2 ч.] / Александр Львовский ; пер. с англ. [Н. Лисова ; ред. А. Ростоцкая]. - Москва : Альпина нон-фикшн - [Ч. 1] : Учебное пособие. - 2021. - 420 с. - URL: <https://znanium.com/catalog/document?id=368791>.
3. Львовский, А. Отличная квантовая механика : [в 2 ч.] / Александр Львовский ; пер. с англ. [Н. Лисова ; ред. А. Ростоцкая]. - Москва : Альпина нон-фикшн - [Ч. 2] : Решения. - 2021. - 304 с. - URL: <https://znanium.com/catalog/document?id=368826>.
4. Пантелеев, А. В. Численные методы. Практикум : учебное пособие / А. В. Пантелеев, И. А. Кудрявцева. - Москва : ИНФРА-М, 2023. - 511 с. URL: <https://znanium.ru/catalog/document?id=427023>.
5. Борзунов, С. В. Языки программирования. Python: решение сложных задач : учебное пособие для вузов / С. В. Борзунов, С. Д. Кургалин. - Санкт-Петербург ; Москва ; Краснодар : Лань, 2023. - 191 с. - URL: <https://e.lanbook.com/book/319394>.

Дополнительная литература

1. Драгунов, В.П. Нанoeлектроника. 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.
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 3–4 задания 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.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы

Тема 3.1. Вариационный метод (2 ч)

1. Решить задачу для стационарного уравнения Шрёдингера 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).

Тема 3.3. Моделирование низкоразмерных систем (2 ч)

1. Сформулировать постановку задачи для расчета стационарных состояний электрона в сферически симметричной квантовой точке.

2. Написать программу для расчета электронных состояний квантовой точки с помощью метода конечных разностей.

3. Провести вычислительный эксперимент для исследования влияния геометрических параметров квантовой точки на энергетический спектр.
(Форма контроля – Отчет по лабораторной работе).

Примерный перечень лабораторных занятий

1. Типы данных и синтаксические особенности языка Python.
2. Функциональное программирование в Python.
3. Библиотека Numpy. Построение графиков в Python.
4. Библиотека Scipy. Типы разреженных матриц и методы работы с ними.
5. Электростатическое поле в вакууме. Проводники и диэлектрики в электрическом поле.
6. Одномерные задачи для стационарного уравнения Шрёдингера с кусочно-постоянным потенциалом.
7. Метод стрельбы численного решения стационарного уравнения Шрёдингера.
8. Метод конечных разностей численного решения одномерного стационарного уравнения Шрёдингера.
9. Нестационарное уравнение Шрёдингера. Моделирование эволюции волнового пакета.
10. Численные методы решения нестационарного уравнения Шрёдингера.
11. Вариационный метод Ритца. Решение задач для стационарного уравнения Шрёдингера с помощью вариационного метода Ритца.
12. Применение метода конечных элементов для решения задач на собственные значения.
13. Общие принципы теории возмущений.
14. Стационарная теория возмущений. Нестационарная теория возмущений.
15. Численный расчет стационарных электрических полей в полупроводниковых наноструктурах.
16. Численное решение задач для стационарного уравнения Шрёдингера в полупроводниковых наноструктурах. Моделирование свойств полупроводниковых наноструктур.
17. Метод Хартри-Фока для расчета состояний многоэлектронных систем и его модификации.

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

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 Numpy. Объект array, операции над массивами.
2. Библиотека Numpy. Функции векторной и матричной алгебры. Функции для работы с многочленами.
3. Библиотека Matplotlib. Функции построения двумерных и трехмерных графиков в Python.
4. Библиотека SciPy. Численное интегрирование. Методы численной оптимизации.
5. Специальные функции и методы работы с ними в библиотеке SciPy.
6. Типы разреженных матриц и методы работы с ними в библиотеке SciPy.
7. Дифференциальные операторы в криволинейных системах координат.
8. Характеристики электромагнитного поля.
9. Уравнения Максвелла.
10. Граничные условия электродинамики и постановка краевых задач.
11. Квантово-механические операторы. Оператор момента импульса.
12. Волновая функция состояния системы. Физический смысл волновой функции. Волновой пакет.
13. Одномерные задачи квантовой механики. Бесконечная потенциальная яма. Конечная потенциальная яма.
14. Одномерные задачи квантовой механики. Конечный потенциальный барьер.

15. Частица в сферически симметричном потенциальном поле.
16. Атом водорода. Сферические волновые функции атома водорода.
17. Атом водорода. Радиальные волновые функции атома водорода. Некоторые свойства волновых функций атома водорода.
18. Вариационный метод Ритца. Вариационная форма задачи на собственные значения.
19. Использование метода конечных элементов для расчета энергетического спектра электрона в наноразмерных структурах.
20. Использование метода конечных разностей для расчета энергетического спектра электрона в наноразмерных структурах.
21. Алгоритм метода Хартри-Фока и его модификации.
22. Общие принципы теории возмущений. Стационарная теория возмущений.
23. Нестационарная теория возмущений.
24. Основные виды простейших полупроводниковых наноструктур. Квантовые ямы, нити, точки.
25. Постановка задач для стационарного уравнение Шредингера при моделировании одноэлектронных состояний в квантовых ямах, нитях, точках.
26. Моделирование энергетического спектра квантовых ям.
27. Моделирование энергетического спектра квантовых нитей.
28. Моделирование энергетического спектра квантовых точек.
29. Основные принципы квантовых вычислений. Суперпозиция. Запутанность. Принцип измерения.
30. Кубит и его возможные реализации.
31. Реализация двухкубитных операций. Обменное взаимодействие.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УО

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)
Уравнения математической физики	Кафедра компьютерных технологий и систем	Предложения отсутствуют	Рекомендовать к утверждению учебную программу (протокол №13 от 15.05.2025)

Заведующий кафедрой
компьютерных технологий и систем,
доктор педагогических наук,
канд. физ.-мат. наук, профессор


(подпись)

В.В.Казаченок

15.05.2025

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УО

на ____/____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

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

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
