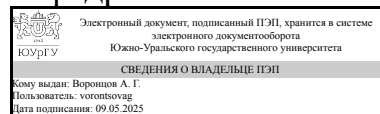


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей
кафедрой



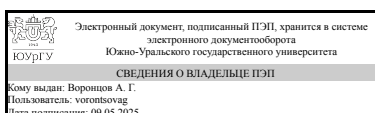
А. Г. Воронцов

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.М0.08.01 Атомистическое моделирование материалов наноэлектроники и фотоники
для направления 11.04.04 Электроника и наноэлектроника
уровень Магистратура
магистерская программа Квантовая инженерия: материалы, электроника, коммуникации и вычисления
форма обучения очная
кафедра-разработчик Физика наноразмерных систем

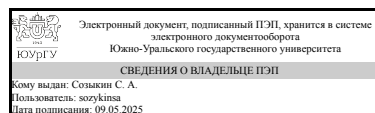
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 11.04.04 Электроника и наноэлектроника, утверждённым приказом Минобрнауки от 22.09.2017 № 959

Зав.кафедрой разработчика,
д.физ.-мат.н., доц.



А. Г. Воронцов

Разработчик программы,
к.физ.-мат.н., доц., доцент



С. А. Созыкин

1. Цели и задачи дисциплины

Цель дисциплины – познакомить студентов в теории и на практике с современными методами атомистического моделирования материалов, применяемых в наноэлектронике и фотонике. Задачи дисциплины: дать навык использования прикладного научного ПО, включая препроцессинг входных данных и постпроцессинг результатов моделирования; дать представление о теоретических основах используемых в таком ПО методов.

Краткое содержание дисциплины

Курс «Атомистическое моделирование материалов наноэлектроники и фотоники» читается студентам на втором семестре магистратуры. Этот курс дает обзор современных методов атомистического моделирования, использующихся для понимания и предсказания свойств материалов, использующихся в наноэлектронике и фотонике. Упор в курсе делается на практическое использование современных техник, алгоритмов и программных пакетов, использующихся при дизайне материалов, начиная с теории и заканчивая инженерией. Практические занятия позволяют студентам наработать практический опыт работы с пакетами, включая подготовку расчетов, их запуск и интерпретацию их результатов. Идеи многомасштабного моделирования, затронутые в курсе, позволяют продемонстрировать потенциал применения обсуждаемых методов к различным областям индустрии будущего, включая нанотехнологии, электронику и возобновляемую энергетику.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Проведение теоретических и экспериментальных исследований в области создания оборудования для систем квантовых коммуникаций	Знает: иерархию уровней моделирования структуры и свойств материалов: микроскопический (атомистический), мезоскопический и макроскопический уровни; теоретические основы построения и исследования квантовых (первопринципных) и классических (молекулярная динамика, Монте-Карло) атомистических моделей вещества; особенности моделирования объемных и низкоразмерных форм материалов, перспективных для использования в устройствах электроники и фотоники Умеет: использовать современные программные пакеты, реализующие методы атомистического классического и квантового моделирования, обработку результатов и их представление Имеет практический опыт: применения современных методов моделирования для решения научно-исследовательских или учебных задач

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Дополнительные главы квантовой механики	Оптические коммуникации, Квантовые вычисления и коммуникации

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
Дополнительные главы квантовой механики	Знает: основные положения квантовой механики, их математическую формулировку; уравнения движения квантовых систем в формах Гейзенберга и Шредингера, приближенные методы решения стационарных и нестационарных задач (теорию возмущений и вариационные метод), Умеет: решать типовые задачи квантовой механики: о свободной частице, о частице в потенциальных ямах размерности 1, 2 и 3 разной глубины и формы, прохождения частицей потенциальных барьеров, задачу о линейном гармоническом осцилляторе путем интегрирования стационарного уравнения Шредингера и с помощью операторов рождения-уничтожения частиц Имеет практический опыт: аналитического и численного решения простых модельных задач, встречающихся в курсах электроники и квантовой оптики

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 ч., 56,5 ч. контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		2
Общая трудоёмкость дисциплины	144	144
<i>Аудиторные занятия:</i>	48	48
Лекции (Л)	16	16
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	32	32
Лабораторные работы (ЛР)	0	0
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	87,5	87,5
Подготовка к контрольным мероприятиям	78	78
Подготовка к экзамену	9,5	9,5
Консультации и промежуточная аттестация	8,5	8,5
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	диф.зачет

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Квантовая механика. Метод Хартри-Фока	8	4	4	0
2	Теория функционала электронной плотности (ТФП)	16	4	12	0
3	Описание сильно коррелированных систем. Расширение ТФП, пост-Хартри-Фоковые методы	24	8	16	0

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол- во часов
1	1	Введение в предмет. Квантовая механика. Уравнение Шредингера. Решение уравнения для атома водорода	2
2	1	Решение уравнения Шредингера для многих частиц. Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод Хартри-Фока.	2
3	2	Теория функционала электронной плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона. Уравнение Кона-Шэма.	2
4	2	Численное решение уравнений Кона-Шэма. Базисы разложения волновых функций. Приближения для обменно-корреляционного взаимодействия.	2
5	3	Интегрирование по зоне Бриллюэна. Псевдопотенциалы. Проблемы ТФП. Гибридные функционалы. ТФП+U.	2
6	3	Динамика решетки: фононы и магноны. Формализм функций Грина. Спектры возбуждения и оптические свойства материалов. Зависящая от времени ТФП (TDDFT).	2
7	3	Введение в моделирование поверхностей, интерфейсов и низкоразмерных систем. Поверхностные электронные состояния: состояния Тамма, состояния Шокли. Поверхностные состояния на полупроводниках.	2
8	3	Описание электронов, локализованных в пространстве. Функции Ванье. Молекулярные орбитали. Химическая связь.	2

5.2. Практические занятия, семинары

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание практического занятия, семинара	Кол- во часов
1	1	Работа в командной строке Linux. Установка и настройка ПО Quantum Espresso.	4
2	2	Моделирование уравнения состояния Бирча-Мурнагана с использованием ПО Quantum Espresso.	4
3	2	Моделирование упругих свойств	4
4	2	Моделирование плотности электронных состояний и зонной структуры	4
5	3	Моделирование материалов с использованием различных функционалов (DFT+U, гибридные функционалы, ван-дер-Ваальс)	4
6	3	Моделирование фононных спектров и зонной структуры фононов	4
7	3	Моделирование электронной структуры низкоразмерных систем	4
8	3	Моделирование транспортных свойств материалов с использованием функций Ванье	4

5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС			
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Семестр	Кол-во часов
Подготовка к контрольным мероприятиям	Воронцов и др, гл.1, гл. 2 (в части практических упражнений), Ибрагимов и др., гл. 2, 3, 8	2	78
Подготовка к экзамену	Воронцов и др.: гл.1, гл. 2 (в части практических упражнений); Ибрагимов и др.: гл. 2, 3, 8; Астахов и др.: параграфы 1.1, 2.1, 3.1, 4.1	2	9,5

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	2	Текущий контроль	Работа 1. Знакомство с пакетом Quantum ESPRESSO	1	3	В отчете должно содержаться описание проделанных студентом шагов по настройке рабочего места. Полностью верный отчет оценивается в 3 балла, за каждую ошибку в требуемых компонентах балл за задание уменьшается на 1.	дифференцированный зачет
2	2	Текущий контроль	Работа 2. Уравнение состояния	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую	дифференцированный зачет

						ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	
3	2	Текущий контроль	Работа 3. Оптимизация структуры	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	дифференцированный зачет
4	2	Текущий контроль	Работа 4. Электронная структура	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	дифференцированный зачет
5	2	Текущий контроль	Работа 5. Плотность электронных состояний	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	дифференцированный зачет
6	2	Текущий контроль	Работа 6. DFT+U	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть	дифференцированный зачет

						входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	
7	2	Текущий контроль	Работа 7. Фононный спектр	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	дифференцированный зачет
8	2	Текущий контроль	Работа 8. Расчет локализованных атомных орбиталей	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	дифференцированный зачет
9	2	Текущий контроль	Работа на занятиях	2	10	Балл за задание складывается из посещаемости занятий и наличия конспектов лекций. За наличие конспекта всех лекций, отражающего основное содержание курса, выставляется 5 баллов. В случае отсутствия или	дифференцированный зачет

						слишком поверхностного изложения материала одной или более лекций балл за конспект не выставляется. Балл за посещаемость выставляется равным 5 баллов умноженным на процент посещенных занятий за семестр.	
10	2	Проме- жуточная аттестация	Дифференцированный зачет	-	40	На экзамене студенту предлагается один теоретический и один практический вопрос. Полный и правильный ответ на теоретический вопрос оценивается в 15 баллов, полный и правильный ответ на практический вопрос (входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и выводы) оценивается в 25 баллов. За каждую ошибку в ответе налагается штраф в 3 балла. Полностью отсутствующий / неверный ответ оценивается в 0 баллов.	дифференцированный зачет

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
дифференцированный зачет	Прохождение контрольного мероприятия промежуточной аттестации не является обязательным для студентов. Студент может пройти контрольное мероприятие промежуточной аттестации для повышения своего рейтинга. Промежуточная аттестация проводится в письменной форме и на компьютерах. Продолжительность экзамена - 2 часа, после 30 минут экзамена экзаменатор собирает и оценивает ответ на теоретический вопрос. Ответ на практический вопрос (входные и выходные файлы программы, величины и графики) оценивается в конце экзамена, при этом студенту могут быть заданы несколько дополнительных вопросов по ответу для проверки понимания ими	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

	материала.	
--	------------	--

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
ПК-1	Знает: иерархию уровней моделирования структуры и свойств материалов: микроскопический (атомистический), мезоскопический и макроскопический уровни; теоретические основы построения и исследования квантовых (первопринципных) и классических (молекулярная динамика, Монте-Карло) атомистических моделей вещества; особенности моделирования объемных и низкоразмерных форм материалов, перспективных для использования в устройствах электроники и фотоники	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
ПК-1	Умеет: использовать современные программные пакеты, реализующие методы атомистического классического и квантового моделирования, обработку результатов и их представление	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
ПК-1	Имеет практический опыт: применения современных методов моделирования для решения научно-исследовательских или учебных задач	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) *основная литература:*

Не предусмотрена

б) *дополнительная литература:*

Не предусмотрена

в) *отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:*

Не предусмотрены

г) *методические указания для студентов по освоению дисциплины:*

1. Воронцов, А. Г. Компьютерные методы моделирования материалов [Текст] учеб. пособие для аспирантов направлений "Физика и астрономия" и "Физ. химия" А. Г. Воронцов, А. Н. Соболев, С. А. Созыкин ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Компьютер. моделирование и нанотехнологии ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2018. - 120, [1] с. электрон. версия

из них: *учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:*

1. Воронцов, А. Г. Компьютерные методы моделирования материалов [Текст] учеб. пособие для аспирантов направлений "Физика и астрономия" и "Физ. химия" А. Г. Воронцов, А. Н. Соболев, С. А. Созыкин ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Компьютер. моделирование и нанотехнологии ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2018. - 120, [1] с. электрон. версия

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Основная литература	ЭБС издательства Лань	Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 384 с. https://e.lanbook.com/book/167744
2	Основная литература	ЭБС издательства Лань	Астахов, А. В. Материалы и элементная база фотоники и оптических устройств связи : учебное пособие / А. В. Астахов, Е. В. Полякова, В. Е. Стригалева. — Санкт-Петербург : СПбГУТ им. М.А. Бонч-Бруевича, 2017. — 78 с. https://e.lanbook.com/book/180199
3	Дополнительная литература	ЭБС издательства Лань	Прудников, В. В. Квантово-статистическая теория твердых тел : учебное пособие / В. В. Прудников, П. В. Прудников, М. В. Мамонова. — 2-е изд., доп. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 448 с. https://e.lanbook.com/book/168909

Перечень используемого программного обеспечения:

1. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)"-Портал "Электронный ЮУрГУ" (<https://edu.susu.ru>)(бессрочно)
2. Canonical Ltd.-Ubuntu(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -The Cambridge Crystallographic Data Centre(31.12.2023)

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Практические занятия и семинары	463 (1)	Компьютеры с предустановленной ОС Ubuntu