

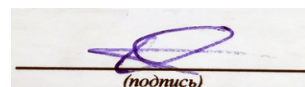
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Базовая кафедра нанотехнологий в электронике в ЯФ ФГБУН  
«Физико-технологический институт» РАН

УТВЕРЖДАЮ

Декан физического факультета



(подпись)

И.С.Огнев

« 23 » мая 2023 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**« Компьютерное моделирование в физике наноструктур »**  
(наименование дисциплины)

Направление подготовки (специальности)

11.04.04 Электроника и наноэлектроника

(код и наименование направления подготовки, специальности)

Направленность (профиль)

«Интегральная электроника и наноэлектроника»

Форма обучения очная

(очная, очно-заочная, заочная)

Программа рассмотрена  
на заседании базовой кафедры  
нанотехнологий в электронике  
протокол №8 от «30» марта 2023 г.

Программа одобрена НМК  
физического факультета

протокол № 5 от « 25 » апреля 2023 г.

Ярославль

## **1. Цели освоения дисциплины**

Целью курса «Компьютерное моделирование в физике наноструктур» является ознакомление студентов с основными идеями и алгоритмами современной вычислительной физики применительно к физике наноструктур. Задачами курса являются: объяснение основных вычислительных методов используемых для моделирования процессов формирования наноструктур, а также для прогнозирования их свойств. Кроме того, целью курса является подготовка студентов к чтению специальной литературы в этой области.

## **2. Место дисциплины в структуре ОП магистратуры**

Данная дисциплина является дисциплиной по выбору и относится к вариативной части Блока 1.

Для освоения данной дисциплины студенты должны владеть навыками программирования на языках высокого уровня и знать основные численные методы применяемые для решения физических задач.

Этот предмет относится к числу специальных курсов и изучает вопросы, лежащие в основе современных методов моделирования наноструктур. Этот курс должен стать основой понимания возможностей и способов использования наноструктур при создании элементов информационных систем. В рамках направления подготовки приобретенные студентами знания и навыки необходимы как при освоении других дисциплин, так и для решения задач в своей профессиональной деятельности.

## **3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОП магистратуры**

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ОП ВО и приобретения следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

Формируемая компетенция (код и формулировка)	Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)	Перечень планируемых результатов обучения
<b>Общепрофессиональные компетенции</b>		
ОПК-2. Способен применять современные методы исследования, представлять и аргументировано защищать результаты выполненной работы	<p>ИД_ОПК-2.1. Знает методы синтеза и исследования моделей.</p> <p>ИД_ОПК-2.2. Осуществляет постановку задачи исследования и оптимизации сложных объектов на основе методов математического моделирования.</p> <p>ИД_ОПК-2.3. Демонстрирует умение методологического анализа научного</p>	<p><b>Знать:</b> основные законы механики курса общей физики, основы квантовой механики, численные методы решения дифференциальных уравнений</p> <p><b>Уметь:</b> формулировать законы движения многоатомных систем</p> <p><b>Владеть навыками:</b> написания кода на языках высокого уровня</p>
<b>Профессиональные компетенции</b>		
ПК-2. Способен разрабатывать эффективные алгоритмы решения сформулированных задач с использованием современных языков программирования и обеспечивать их программную реализацию	<p>ИД_ПК-2.1. Знает методы разработки эффективных алгоритмов решения научно-исследовательских задач.</p> <p>ИД_ПК-2.2. Применяет алгоритмы решения исследовательских задач с использованием современных языков программирования.</p> <p>ИД_ПК-2.3. Обладает навыками разработки стратегии и</p>	<p><b>Знать:</b> основные методы компьютерного моделирования атомных структур</p> <p><b>Уметь:</b> разрабатывать базовые алгоритмы и писать код на языке высокого уровня</p> <p><b>Владеть навыками:</b> использования результатов моделирования для решения задач в области физики наноструктур</p>

#### 4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единиц, 72 акад. часов.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Формы текущего контроля успеваемости Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Введение	3	2					4	Опрос
2	Численные методы	3	4		4			5	Опрос
3	Метод молекулярной динамики	3	2		4	2		4	Опрос
4	Метод кинетического Монте-Карло	3	2		2			4	Опрос
5	Примеры применений в физике наноструктур	3	4		4	3		4	Опрос
6	Моделирование неупорядоченных сред	3	2		2			4	Опрос
							0.3	9.7	Зачет
	<b>Всего</b>		<b>16</b>		<b>16</b>	<b>5</b>	<b>0.3</b>	<b>34.7</b>	

#### Содержание разделов дисциплины

##### Тема № 1: Введение

Физика наноструктур. Процессы роста и самоформирования. Особенности структуры и возможные дефекты. Методы компьютерного моделирования в физике наноструктур.

##### Тема № 2: Численные методы

Основные методы численного решения дифференциальных уравнений. Методы минимизации функций многих переменных.

##### Тема № 3: Методика молекулярной динамики

Основы молекулярной динамики. NVE, NVT, NPT ансамбли. Периодические граничные условия. Оптимизация алгоритма, выбор временного шага.

##### Тема № 4: Метод кинетического Монте-Карло

Основы теории переходных состояний. Метод молекулярной статики. Метод Кинетического Монте-Карло.

##### Тема № 5: Примеры применений в физике наноструктур

Моделирование процессов релаксации внутренних напряжений в гетероструктурах. Моделирование процессов поверхностной диффузии. Коллективные эффекты в динамике наноструктур

## Тема № 6

Структура неупорядоченных сред. Методы математического описания неупорядоченных сред. Структурный фактор и функция радиального распределения. Методы статистической геометрии. Многогранники Вороного.

## 5. Образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

**Вводная лекция** – дает первое целостное представление о дисциплине (или ее разделе) и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Студенты знакомятся с назначением и задачами курса, его ролью и местом в системе учебных дисциплин и в системе подготовки специалиста. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках курса, а также дается анализ рекомендуемой учебно-методической литературы.

**Академическая лекция** (или лекция общего курса) – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Требования к академической лекции: современный научный уровень и насыщенная информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, обоснований, фактов.

Академическая лекция, как правило, состоит из трех частей: вступления (введения), изложения и заключения:

- вступление (введение) определяет тему, план и цель лекции. Оно призвано заинтересовать и настроить аудиторию, сообщить, в чём заключается предмет лекции и (или) её актуальность, основная идея (проблема, центральный вопрос), связь с предыдущими и последующими занятиями, поставить её основные вопросы. Введение должно быть кратким и целенаправленным.
- изложение является основной частью лекции, в которой реализуется научное содержание темы, ставятся все узловые вопросы, приводится вся система доказательств с использованием наиболее целесообразных методических приемов. Каждое теоретическое положение должно быть обосновано и доказано, приводимые формулировки и определения должны быть четкими, насыщенными глубоким содержанием.
- заключение обобщает в кратких формулировках основные идеи лекции, логически ее завершая. В заключении могут даваться рекомендации о порядке дальнейшего изучения основных вопросов лекции самостоятельно по указанной литературе.

**Практическое занятие** – занятие, посвященное освоению конкретных умений и навыков и закреплению полученных на лекции знаний по предложенному алгоритму.

**Лабораторная работа** – организация учебной работы с реальными материальными и информационными объектами, экспериментальная работа с аналоговыми моделями реальных объектов.

**6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень лицензионного программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости).**

В процессе подготовки и осуществления образовательного процесса используются:

- для подготовки и проведения лекций программа Power Point из пакета Microsoft Office
- для поиска учебной литературы интернет ресурсы библиотеки ЯрГУ

**7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины**

**а) основная литература**

1. Д.В. Хеерман, Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике, Москва. Наука, 1990.
2. Х. Гулд, Я. Тобочник, Компьютерное моделирование в физике, т.1,2, Москва.Мир, 1990

**б) дополнительная литература**

1. Р. Хокни, Дж. Иствуд, Численное моделирование методом частиц, Москва.Наука, 1987.
2. Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельников, Численные методы, Москва.Наука, 1987.

**в) ресурсы сети «Интернет»:**

1. Электронные каталоги НБ ЯрГУ ([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php))
2. Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека online» ([www.biblioclub.ru](http://www.biblioclub.ru) )
3. сайт с описанием пакета Moldy: <http://www.earth.ox.ac.uk/~keithr/moldy.html>
4. сайт с описанием пакета LAMMPS <http://lammps.sandia.gov/>

**8. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Аудитории, оборудованные для проведения лекций и практических занятий.

Компьютерные классы для проведения лабораторных работ.

Мультимедийный проектор, персональный компьютер (ноутбук), класс персональных компьютеров, локальная сеть с выходом в Интернет.

Автор(ы) :

доцент, кандидат ф.-м.н.

(должность, ученая степень)

(подпись)

Трушин О.С.

(Фамилия И.О.)

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины**  
**« Компьютерное моделирование в физике наноструктур »**  
*(наименование дисциплины)*

**Фонд оценочных средств**  
**для проведения текущей и промежуточной аттестации студентов**  
**по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания или иные материалы,**  
**необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности,**  
**характеризующих этапы формирования компетенций**

**1.1 Контрольные задания и иные материалы,**  
**используемые в процессе текущей аттестации**

**1.2 Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации**

**Список вопросов к зачету**

1. Простые примеры численного интегрирования уравнений движения
2. Описать базовый алгоритм молекулярной динамики.
3. Обосновать выбор классической механики для описания многоатомных систем.
4. Основные виды потенциалов межатомного взаимодействия.
5. Причины использования периодических граничных условий и способы их реализации в модели.
6. Радиус обрыва потенциала взаимодействия и список ближайших соседей.
7. Критерии выбора величины временного шага в молекулярной динамике.
8. Каким образом достигается минимизация потенциальной энергии системы с использованием молекулярной динамики.
9. Основные статистические ансамбли реализуемые в рамках молекулярной динамики
10. Метод Монте-Карло. Отличие классического Монте-Карло от кинетического.
11. Методы минимизации функции многих переменных.
12. Градиентный спуск.
13. Метод сопряженных градиентов.
14. Основы теории переходных состояний. Формула Аррениуса.
15. Основные методы активации редких событий.
16. Методы нахождения пути минимальной энергии.
17. Основы метода релаксации упругой цепочки.
18. Метод направления минимальной кривизны.
19. Метод димера.
20. Роль многочастичных процессов в диффузии кластеров
21. Механизмы релаксации упругих напряжений в гетероэпитаксиальных структурах
22. Алгоритм самообучаемого кинетического Монте-Карло.

23. Методы описания структуры жидких и аморфных веществ.
24. Функция радиального распределения.
25. Структурный фактор. Связь структурного фактора и функции радиального распределения.
26. Основы статистической геометрии. Многогранники Вороного. Какие типы многогранников характеризуют жидкую и аморфную структуру, какие ГЦК и ОЦК решетки ?

**Зачет выставляется по результатам краткого собеседования со студентом**

## **2. Перечень компетенций, этапы их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкалы оценивания**

### **2.1 Шкала оценивания сформированности компетенций и ее описание**

Оценивание уровня сформированности компетенций в процессе освоения дисциплины осуществляется по следующей трехуровневой шкале:

**Пороговый уровень** - предполагает отражение тех ожидаемых результатов, которые определяют минимальный набор знаний и (или) умений и (или) навыков, полученных студентом в результате освоения дисциплины. Пороговый уровень является обязательным уровнем для студента к моменту завершения им освоения данной дисциплины.

**Продвинутый уровень** - предполагает способность студента использовать знания, умения, навыки и (или) опыт деятельности, полученные при освоении дисциплины, для решения профессиональных задач. Продвинутый уровень превосходит пороговый уровень по нескольким существенным признакам.

**Высокий уровень** - предполагает способность студента использовать потенциал интегрированных знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, полученных при освоении дисциплины, для творческого решения профессиональных задач и самостоятельного поиска новых подходов в их решении путем комбинирования и использования известных способов решения применительно к конкретным условиям. Высокий уровень

превосходит пороговый уровень по всем существенным признакам.



**2.2 Перечень компетенций, этапы их формирования,  
описание показателей и критериев оценивания компетенций  
на различных этапах их формирования**

Код компетенции	Форма контроля	Этапы формирования (№ темы (раздела))	Показатели оценивания	Шкала и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования		
				Пороговый уровень	Продвинутый уровень	Высокий уровень
Общекультурные компетенции						
Общепрофессиональные компетенции						
ОПК-2	зачет		Владеть навыками: написания кода на языках высокого уровня	Умение создавать простые программы на С++ и Fortran , проводить их отладку и поиск ошибок в коде	Умение использовать простые численные схемы для решения дифференциальных уравнений	
Профессиональные компетенции						
ПК-2	зачет	1-6	Владеть навыками: разрабатывать эффективные алгоритмы решения сформулированных задач с использованием современных языков программирования и обеспечивать их программную реализацию	1.Разработки алгоритма молекулярной динамики 2.Разработки алгоритма Монте-Карло 3.Использования межатомных потенциалов различных типов 4.Анализа структуры неупорядоченных сред в терминах статистической геометрии	Нахождение пути минимальной энергии методом упругой цепочки	Демонстрация навыков на конкретных примерах физики наноструктур
Профильные компетенции						

**3. Методические рекомендации преподавателю  
по процедуре оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности,  
характеризующих этапы формирования компетенций**

Целью процедуры оценивания является определение степени овладения студентом ожидаемыми результатами обучения (знаниями, умениями, навыками и (или) опытом деятельности).

Процедура оценивания степени овладения студентом ожидаемыми результатами обучения осуществляется с помощью методических материалов, представленных в разделе «Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций»

### **3.1 Критерии оценивания степени овладения знаниями, умениями, навыками и (или) опытом деятельности, определяющие уровни сформированности компетенций**

#### **Пороговый уровень (общие характеристики):**

- владение основным объемом знаний по программе дисциплины;
- знание основной терминологии данной области знаний, стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы без существенных ошибок;
- владение инструментарием дисциплины, умение его использовать в решении стандартных (типовых) задач;
- способность самостоятельно применять типовые решения в рамках рабочей программы дисциплины;
- усвоение основной литературы, рекомендованной рабочей программой дисциплины;
- знание базовых теорий, концепций и направлений по изучаемой дисциплине;
- самостоятельная работа на практических и лабораторных занятиях, периодическое участие в групповых обсуждениях, достаточный уровень культуры исполнения заданий.

#### **Продвинутый уровень (общие характеристики):**

- достаточно полные и систематизированные знания в объеме программы дисциплины;
- использование основной терминологии данной области знаний, стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы, умение делать выводы;
- владение инструментарием дисциплины, умение его использовать в решении учебных и профессиональных задач;
- способность самостоятельно решать сложные задачи (проблемы) в рамках рабочей программы дисциплины;
- усвоение основной и дополнительной литературы, рекомендованной рабочей программой дисциплины;
- умение ориентироваться в базовых теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им сравнительную оценку;
- самостоятельная работа на практических и лабораторных занятиях, участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

#### **Высокий уровень (общие характеристики):**

- систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам дисциплины;
- точное использование терминологии данной области знаний, стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы, умение делать обоснованные выводы;
- безупречное владение инструментарием дисциплины, умение его использовать в постановке и решении научных и профессиональных задач;

- способность самостоятельно и творчески решать сложные задачи (проблемы) в рамках рабочей программы дисциплины;
- полное и глубокое усвоение основной и дополнительной литературы, рекомендованной рабочей программой дисциплины;
- умение ориентироваться в основных теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им критическую оценку;
- активная самостоятельная работа на практических и лабораторных занятиях, творческое участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

### **3.2 Описание процедуры выставления оценки**

В зависимости от уровня сформированности каждой компетенции по окончании освоения дисциплины студенту выставляется оценка. Вид оценки («зачтено», «незачтено») определяется рабочей программой дисциплины в соответствии с учебным планом.

Оценка «зачет» выставляется студенту, у которого каждая компетенция (полностью или частично формируемая данной дисциплиной) сформирована не ниже, чем на пороговом уровне.

Оценка «незачтено» выставляется студенту, у которого хотя бы одна компетенция (полностью или частично формируемая данной дисциплиной) сформирована ниже, чем на пороговом уровне.

**Приложение №2 к рабочей программе дисциплины**  
**« Компьютерное моделирование в физике наноструктур »**  
*(наименование дисциплины)*

**Методические указания для студентов по освоению дисциплины**

Основной формой изложения материала по дисциплине «Компьютерное моделирование в физике наноструктур» являются лекции в объеме 16 часов. Это связано с необходимостью описания основных численных методов применяемых в моделировании и базовых алгоритмов их реализации.

На практических занятиях проводится закрепление полученного теоретического материала путем разбора практических примеров применения компьютерного моделирования в физике наноструктур.

Для успешного освоения дисциплины важно активное участие студентов на практических занятиях, а также их самостоятельная работа дома. Рекомендуется регулярное повторение пройденного материала и чтение рекомендованной литературы.

На лабораторных занятиях студенты ( под руководством преподавателя) проводят тестовые расчеты с использованием имеющихся примеров программ. При этом особое внимание уделяется анализу получаемых данных и их физической интерпретации.

В конце семестра студенты сдают зачет, который проводится в форме устного опроса по списку вопросов.

Освоить вопросы излагаемые в данном курсе самостоятельно студенту достаточно сложно. Поэтому посещение аудиторных занятий является необходимым.

**Учебно-методическое обеспечение  
самостоятельной работы студентов по дисциплине**

**а) основная литература**

1. Д.В. Хеерман, Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике, Москва. Наука, 1990.
2. Х. Гулд, Я. Тобочник, Компьютерное моделирование в физике, т.1,2, Москва.Мир, 1990
3. Д.К. Рапапорт Искусство молекулярной динамики / Москва – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика» 2012.

**б) дополнительная литература**

1. Р. Хокни, Дж. Иствуд, Численное моделирование методом частиц, Москва.Наука, 1987.
2. Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельников, Численные методы, Москва.Наука, 1987.

**в) ресурсы сети «Интернет»:**

1. Электронные каталоги НБ ЯрГУ  
([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php))
2. Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека online»  
([www.biblioclub.ru](http://www.biblioclub.ru) )
3. сайт с описанием пакета Moldy: <http://www.earth.ox.ac.uk/~keithr/moldy.html>
4. сайт с описанием пакета LAMMPS <http://lammps.sandia.gov/>