

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования_
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением Ученого совета ННГУ

протокол № 4 от 26.04.2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Методы вычислений в нанофизике

Уровень высшего образования

Магистратура

Направление подготовки / специальность

28.04.01 - Нанотехнологии и микросистемная техника

Направленность образовательной программы

Квантовые и нейроморфные технологии

Форма обучения

очная

г. Нижний Новгород

2025 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.02 Методы вычислений в нанофизике относится к части, формируемой участниками образовательных отношений образовательной программы.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
ПК-3: Способен разрабатывать физические и математические модели, проводить компьютерное моделирование исследуемых физических процессов в области нанотехнологии, нанoeлектроники и квантовых технологий	<p>ПК-3.1: Имеет представление о физических и математических моделях, а также методах компьютерного моделирования исследуемых физических процессов в области нанотехнологии, нанoeлектроники и квантовых технологий</p> <p>ПК-3.2: Может применять физические и математические модели, а также методы компьютерного моделирования исследуемых физических процессов в области нанотехнологии, нанoeлектроники и квантовых технологий</p> <p>ПК-3.3: Разрабатывает физические и математические модели, а также методы компьютерного моделирования исследуемых физических процессов в области нанотехнологии, нанoeлектроники и квантовых технологий</p>	<p>ПК-3.1:</p> <p>Знать современные теоретические модели нанофизики.</p> <p>Уметь совершенствовать теоретические модели нанофизики.</p> <p>Владеть навыками разработки теоретических моделей нанофизики.</p> <p>ПК-3.2:</p> <p>Знать современные методические подходы в нанофизике.</p> <p>Уметь совершенствовать и внедрять методические подходы в нанофизике.</p> <p>Владеть навыками разработки методических подходов в нанофизике.</p> <p>ПК-3.3:</p> <p>Знать современные численные методы в нанофизике.</p> <p>Уметь совершенствовать и внедрять численные методы в нанофизике.</p> <p>Владеть навыками разработки численных</p>	Индивидуальное устное собеседование	Зачёт: Отчет по лабораторным работам

		методов в нанофизике.		
--	--	-----------------------	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	2
Часов по учебному плану	72
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	16
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	16
- КСР	1
самостоятельная работа	39
Промежуточная аттестация	0 Зачёт

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/ лабора- торные работы), часы	Всего	
	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о
1. Численный расчет квантовых состояний в наноструктурах.	24	6	6	12	12
2. Численный расчет транспортных свойств наноструктур.	28	6	6	12	16
3. Колебания связанных цепочек атомов.	19	4	4	8	11
Аттестация	0				
КСР	1				1
Итого	72	16	16	33	39

Содержание разделов и тем дисциплины

1. Численный расчет квантовых состояний в наноструктурах.

Расчет квантовых состояний в низкоразмерных системах с использованием сеточных методов. Расчет состояний в квантовых ямах при согласованном решении уравнения Шредингера и уравнения Пуассона.

2. Численный расчет транспортных свойств наноструктур.

Численное решение квазиклассического уравнения Больцмана для описания кинетических явлений в двумерных системах. Расчеты вольт-амперных характеристик.

3. Колебания связанных цепочек атомов.

Численный расчет колебательных спектров связанных цепочек атомов. Моделирование динамика линейных и нелинейных цепочек. Проблема Ферми-Пасты-Улама.

Практические занятия /лабораторные работы организуются, в том числе, в форме практической подготовки, которая предусматривает участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью.

На проведение практических занятий / лабораторных работ в форме практической подготовки отводится: очная форма обучения - 32 ч.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

1. Моделирование энергетического спектра для электронов в наноструктурах методом пристрелки : практикум / В. Н. Агарев ; ННГУ им. Н. И. Лобачевского. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2017. - 8 с. - Текст : электронный.

<https://e-lib.unn.ru/MegaPro/Download/MObject/1656>

2. Моделирование энергетического спектра для электронов в квантовых ямах : практикум / В. Н. Агарев ; ННГУ им. Н. И. Лобачевского. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2017. - 12 с. - Текст : электронный.

<https://e-lib.unn.ru/MegaPro/Download/MObject/1655>

3. Моделирование и оптимизация резонансно-туннельного диода. Описание лабораторной работы : учебно-методическое пособие / В. Н. Агарев, С. В. Хазанова, А. С. Абросимов, В. Е. Дегтярев ; ННГУ им. Н. И. Лобачевского. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2013. - 8 с. - Текст : электронный.

<https://e-lib.unn.ru/MegaPro/Download/MObject/2556>

4. Моделирование энергетического спектра для электронов в связанных квантовых ямах : описание лабораторной работы / В. Н. Агарев, С. В. Хазанова, А. С. Абросимов, В. Е. Дегтярев ; ННГУ им. Н. И. Лобачевского. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2012. - 6 с. - Текст : электронный.

<https://e-lib.unn.ru/MegaPro/Download/MObject/2667>

5. Перов А.А., Солнышкова Л.В. Магнитотранспорт и оптика полупроводниковых решеточных структур спинтроники / Учебное пособие. - Н. Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2010. – 44 с. – Текст : электронный.

<https://cloud.unn.ru/s/QFXsdQt5zymAtgF>

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Индивидуальное устное собеседование) для оценки сформированности компетенции ПК-3:

1. Методы численного решения задач на собственные векторы и собственные значения.
2. Метод Хаусхолдера.
3. Методы численного решения кинетического уравнения Больцмана.
4. Численное интегрирование с дельта-функцией Дирака.
5. Проблема Ферми-Пасты-Улама.

Критерии оценивания (оценочное средство - Индивидуальное устное собеседование)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Обучающийся успешно показал базовые знания теоретических основ курса
не зачтено	Обучающийся не продемонстрировал никаких знаний теоретических основ курса

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено			зачтено			
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений.	При решении стандартных задач не	Продемонстрированы основные	Продемонстрированы все	Продемонстрированы все	Продемонстрированы все	Продемонстрированы все основные

	Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	основные умения. Решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Отчет по лабораторным работам) для оценки сформированности компетенции ПК-3

В ходе изучения курса обучающийся обязан выполнить 2 лабораторные работы из разных разделов курса. Лабораторные работы представляют собой задачу, требующую численного решения. Задачу необходимо численно формализовать, запрограммировать, используя одно из доступных средств программирования, а затем продемонстрировать преподавателю ее численное решение, включая тест программы для заданных преподавателем входных данных. Бесплатное ПО, доступное обучающемуся, перечислено в соответствующем разделе рабочей программы дисциплины.

Типовые лабораторные работы.

1. Лабораторная работа "Численный расчет спектра полупроводниковой квантовой ямы с неоднородным распределением легирующей примеси методом согласованного решения уравнения Шредингера и уравнения Пуассона".

Лабораторная работа описана в методических материалах к дисциплине:

Моделирование энергетического спектра для электронов в квантовых ямах : практикум / В. Н. Агарев ; ННГУ им. Н. И. Лобачевского. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2017. - 12 с. - Текст : электронный.

2. Лабораторная работа "Численный расчет спектра полупроводниковой квантовой ямы с расположенным вблизи нее дельта-слоем примеси методом согласованного решения уравнения Шредингера и уравнения Пуассона".

Лабораторная работа описана в методических материалах к дисциплине:

Моделирование энергетического спектра для электронов в квантовых ямах : практикум / В. Н. Агарев ; ННГУ им. Н. И. Лобачевского. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2017. - 12 с. - Текст : электронный.

3. Лабораторная работа "Численный расчет тензора проводимости в двоякопериодической полупроводниковой сверхрешетке в двумерном электронном газе".

Лабораторная работа описана в методических материалах к дисциплине:

Перов А.А., Солнышкова Л.В. Магнитотранспорт и оптика полупроводниковых решеточных структур спинтроники / Учебное пособие. - Н. Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2010. – 44 с.

По итогам решения численной задачи студент обязан написать отчет по лабораторной работе. Отчет должен демонстрировать результат численного решения задачи, а также тест программы для заданных преподавателем входных данных. Отчет должен включать следующие обязательные элементы: содержание, цель работы, теоретическую часть, описание методики численного эксперимента, практическую часть, включающую описание и обсуждение результатов, заключение и/или выводы, список использованных источников. Отчет не должен содержать неправомерных заимствований.

Объем отчета – 15-30 стр. формата А4 (шрифт Times New Roman 12 пт, межстрочный интервал – полуторный, интервал между абзацами – отсутствует, поля – верхнее 2 см, нижнее 2 см, левое 3 см, правое 1,5 см).

Критерии оценивания (оценочное средство - Отчет по лабораторным работам)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Лабораторные работы выполнены, отчеты представлены и приняты преподавателем.
не зачтено	Лабораторные работы не выполнены, либо по ним не представлены отчеты, либо отчеты не приняты преподавателем по причине наличия в них существенных недоработок,

Оценка	Критерии оценивания
	методических ошибок при выполнении лабораторных работ или неправомерных заимствований.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Численные методы квантовой статистики / Кашурников В.А., Красавин А.В. - Москва : Физматлит, 2010., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=634903&idb=0>.
2. Барановский В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие для вузов / Барановский В. И. - 4-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2024. - 428 с. - Книга из коллекции Лань - Химия. - ISBN 978-5-507-49478-1., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=894499&idb=0>.
3. Драгунов Валерий Павлович. Нанoeлектроника в 2 ч. Часть 1 : учебное пособие для вузов / В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин. - 3-е изд. - Москва : Юрайт, 2024. - 285 с. - (Высшее образование). - URL: <https://urait.ru/bcode/536922> (дата обращения: 15.08.2024). - ISBN 978-5-534-05170-4 : 1259.00. - Текст : электронный // ЭБС "Юрайт", <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=905810&idb=0>.
4. Драгунов Валерий Павлович. Нанoeлектроника в 2 ч. Часть 2 : учебное пособие для вузов / В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин. - 3-е изд. - Москва : Юрайт, 2024. - 235 с. - (Высшее образование). - URL: <https://urait.ru/bcode/539592> (дата обращения: 15.08.2024). - ISBN 978-5-534-05171-1 : 1069.00. - Текст : электронный // ЭБС "Юрайт", <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=910379&idb=0>.

Дополнительная литература:

1. Вычисления на квазиравномерных сетках / Калиткин Н. Н., Альшин А. Б., Альшина Е. А., Рогов Б. В. - Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2005. - 224 с. - Библиогр.: доступна в карточке книги, на сайте ЭБС Лань. - Книга из коллекции ФИЗМАТЛИТ - Математика. - ISBN 5-9221-0565-5., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=700500&idb=0>.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

- 1) Microsoft Visual Studio Community Edition с расширением Python;
- 2) интернет-ресурсы Фундаментальной библиотеки ННГУ <http://www.lib.unn.ru/>.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения, компьютерами.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки/специальности 28.04.01 - Нанотехнологии и микросистемная техника.

Автор(ы): Конаков Антон Алексеевич, кандидат физико-математических наук
Перов Анатолий Александрович, кандидат физико-математических наук, доцент.

Заведующий кафедрой: Бурдов Владимир Анатольевич, доктор физико-математических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 15.04.2024, протокол № б/н.