ИНСТИТУТ МАГИСТРАТУРЫ

КАФЕДРА ЛАЗЕРНЫХ МИКРО- И НАНОТЕХНОЛОГИЙ

Утверждено на заседании кафедры

протокол №\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

от «\_\_\_\_»\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2014 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, РАСЧЕТ И ПРОЕКТИРОВАНИЕ НАНОСИСТЕМ

|  |  |
| --- | --- |
| Направление подготовки (специальность) | 14.04.02 Ядерные физика и технологии |
| Профиль подготовки (при его наличии) |  |
| Наименование образовательной программы (специализация) | Биомедицинская фотоника |
| Квалификация (степень) выпускника | Магистр |
| Форма обучения | очная |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Семестр** | **Интерактив** | **Трудоемкость, кред.** | **Общий объем курса, час.** | **Лекции, час.** | **Практич. занятия, час.** | **Лаборат. работы, час.** | **СРС, час.** | **КСР, час.** | **Форма(ы) контроля, экз./зач./КР/КП** |
| 1 |  | 6 | 216 | 8 | 40 | 16 | 116 | 0 | Э |
| ИТОГО | 56 | 6 | 216 | 8 | 40 | 16 | 116 | 0 |  |

Группа: М01-87

Аннотация

1. Цели освоения учебной дисциплины

Дисциплина Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем относится к циклу профессиональных дисциплин и обеспечивает логическую взаимосвязь и имеет своей целью:

 - подготовка к самостоятельной научно-исследовательской и проектной работе в составе научных коллективов.

 Задачи дисциплины:

 - расширение научного кругозора и эрудиции студентов на базе изучения современных программ моделирования и проектирования нанострутур.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВПО

Данная дисциплина программы логически и содержательно-методически связана со следующими предшествующими дисциплинами: общая физика, теория поля, квантовая механика, физическая оптика, теория колебаний, атомная и молекулярная спекроскопия, физика конденсированных сред, разделы математики: дифференциальное и интегральное исчисления, теория рядов, уравнения математической физики, теория вероятностей. Освоение данной дисциплины имеет, во-первых, самостоятельное значение и является также основой для усвоения специальных курсов по физике конденсированных сред, в частности, разделов, связанных с изучением синтеза, исследования и разработки применения для различных нано- и микро- структур.

3. КОМПЕТЕНЦИИ СТУДЕНТА, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ/ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБРАЗОВАНИЯ И КОМПЕТЕНЦИИ СТУДЕНТА ПО ЗАВЕРШЕНИИ ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОК-1, ОПК-1, ПК-1, ПК-3, ПК-4, ПК-9, ПСК-4

В результате освоения дисциплины студент должен:

Знать:

З1. Понятие моделирования; виды моделей; понятие наноструктур; особенности моделирования наноструктур

З2. Классификация моделей; точные и приближенные решения; эмирические модели и модели из «первых принципов»; модели, основанные на классической механике; Модели, основанные на квантовой теории

З3. Основы квантовомеханического представления; квантование; уравнение Шредингера

З4. Кристаллические тела; решетки Браве; базис; прямое и обратное пространства; закон дисперсии

З5. Метод молекулярной динамики; метод самосогласованного поля; метод эмпирического псевдопотенциала; теория функционала электронной плотности; модель сильной связи; метод сверхячейки; модель складывания зоны

З6. Виды вычислительных средств; кластерная и симметричная мультипроцессорность; параллельные вычисления; роль компьютеров; роль юникс-подобных операционных систем в моделировании

З7. Программные пакеты, используемые для расчета и проектирования наносистем

З8. Экспериментальные методы исследования наносистем; спектроскопия оптического поглощения; фотолюминесцентная спектроскопия; спектроскопия комбинационного рассеяния света; электронная микроскопия

Уметь:

У1. Выбирать подходящую модель для каждого вида исследуемого материала и требуемого результата

У2. Использовать вычислительную технику для численного решения уравнений

У3. Выбирать требуемый вид вычислительного компьютера

У4. Использовать юникс-подобные операционные системы для моделирования

У5. Использовать различные программные пакеты для моделирования наностуктур

У6. Анализировать полученные результаты, сравнивать с экспериментально полученными данными

Владеть:

В1. Различными методами моделирования наноструктур

В2. Навыками по работе в юникс-подобных операционных системах

В3. Навыками в использовании специальных программных пакетов для моделирования наноструктур, в том числе с использованием кластерных суперкомпьютеров

4. Структура и содержание учебной дисциплины

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **№ п.п** | **Наименование раздела учебной дисциплины** | **Недели** | **Лекции, час.** | **Практ. занятия/ семинары, час.** | **Лабораторные работы, час.** | **Обязат. текущий контроль (форма\*, неделя)** | **Аттестация раздела (форма\*, неделя)** | **Максимальный балл за раздел\*\*** |
|  | *1 семестр* |  |  |  |  |  |  |  |
| 1 | Теоретические основы моделирования | 1-5 | 5 | 15 | 0 | Т-5 | КИ, 5 | 20 |
| 2 | Вычислительные методы моделирования | 6-14 | 2 | 16 | 16 | Т-14 | КИ, 14 | 20 |
| 3 | Экспериментальные методы исследования наносистем | 14-16 | 1 | 9 | 0 | Т-16 | КИ, 16 | 10 |
|  | *Итого за 1 семестр* |  | 8 | 40 | 16 |  |  | 50 |
|  | **Контрольные мероприятия после 1 семестра** |  |  |  |  |  | Э | 50 |

\* – сокращенное наименование формы контроля

\*\* – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

КИ Контроль по итогам

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Недели** | **Темы занятий / Содержание**  | **Лек., час.** | **Пр./сем., час.** | **Лаб., час.** |
|  | *1 семестр* | 8 | 40 | 16 |
| 1 | **Введение в компьютерное моделирование**Часть 1. Понятие моделирования. Выбор модели. Области применения. Эмпирические модели. Модели из первых принципов. Наноструктуры. Особенности моделирования наноструктур. Точные и приближенные решения.
Часть 2. Компьютерное моделирование. Роль компьютеров. Вычислительные методы. Виды компьютеров. Роль юникс-подобных операционных систем в моделировании.  | 1 |  |  |
| 1 | **Квантовомеханические и классические модели**Часть 1. Модели, основанные на классической механике. Области применения. Положительные и отрицательные стороны.
Часть 2. Модели, основанные на квантовой теории. Области применения. Преимущества перед классическими методами. Недостатки моделей.  | 1 |  |  |
| 1 - 5 | **Основные методы**Часть 1. Основы квантовомеханического представления. Квантование. Уравнение Шредингера.
Часть 2. Кристаллические тела. Решетки Браве. Базис. Прямое и обратное пространства. Закон дисперсии. Наноструктуры.
Часть 3. Метод молекулярной динамики. Области применения. Особенности реализации на суперкомпьютерах.
Часть 4. Метод самосогласованного поля.
Часть 5. Метод эмпирического псевдопотенциала.
Часть 6. Теория функционала электронной плотности.
Часть 7. Модель сильной связи.
Часть 8. Особенности моделирования наноструктур. Метод сверхячейки. Модель складывания зоны. | 3 | 15 |  |
| 6 - 7 | **Вычислительные средства.**Часть 1. Виды вычислительных средств. Персональные компьютеры. Портативные компьютеры. Высокопроизводительные компьютеры. Вычислительные средства, на основе графических процессоров. Кластерная и симметричная мультипроцессорность. Параллельные вычисления. Преимущества и недостатки различных решений.
Часть 2. Использование юникс-подобных операционных систем. Основы работы. Удаленное управление. Установка, компиляция и запуск расчетных задач. Особенности работы на кластерных суперкомпьютерах. | 1 | 2 | 2 |
| 7 - 14 | **Программные продукты для моделирования наносистем.**Часть 1. Обзор программных пакетов, используемых для расчета и проектирования наносистем.
Часть 2. Программный комплекс Avogadro. Конструирование наносистем. Оптимизация геометрий. Экспорт и импорт данных в другие системы.
Часть 3. Программный пакет с открытым исходным кодом PWSCF. Теоретические основы. Основные возможности пакета.  | 1 | 14 | 14 |
| 14 - 16 | **Экспериментальные методы исследования наносистем**Часть 1. Обзор основных методов исследования.
Часть 2. Спектроскопия оптического поглощения
Часть 3. Фотолюминесцентная спектроскопии
Часть 4. Спектроскопия комбинационного рассеяния света
Часть 5. Электронная микроскопия | 1 | 9 |  |

ТЕМЫ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

|  |  |
| --- | --- |
| **Недели** | **Темы занятий / Содержание** |
|  | *1 семестр* |
| 7 | **Использование Unix-подобных операционных систем**Основы работы с Unix-подобными операционными системами. Коммандная строка. Основные команды. Файловый менеджер. Подключение по ssh. Установка и компиляция программ из исходных кодов |
| 8 - 9 | **Работа с пакетом Avogadro**Визуализация углеродных наноструктур. Оптимизация геометрий методом молекулярной динамики. Экспорт и импорт данных в другие системы |
| 10 - 12 | **Работа с пакетом PWSCF (часть 1)**Моделирование зонной структуры кристалического кремния. Определение параметров моделирования (энергию обрезки, сетка K-точек, псевдопотенциал) |
| 13 - 14 | **Работа с пакетом PWSCF (часть 2)**Моделирование зонной структуры графена с использованием метода сверхячейки. Построение электронных дисперсионных зависимостей. |

ТЕМЫ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

|  |  |
| --- | --- |
| **Недели** | **Темы занятий / Содержание** |
|  | *1 семестр* |
| 1 - 5 | **Методы моделирования**Часть 1. Основы квантовомеханического представления. Квантование. Уравнение Шредингера.
Часть 2. Кристаллические тела. Решетки Браве. Базис. Прямое и обратное пространства. Закон дисперсии. Наноструктуры.
Часть 3. Метод молекулярной динамики. Области применения. Особенности реализации на суперкомпьютерах.
Часть 4. Метод самосогласованного поля.
Часть 5. Метод эмпирического псевдопотенциала.
Часть 6. Теория функционала электронной плотности.
Часть 7. Модель сильной связи.
Часть 8. Особенности моделирования наноструктур. Метод сверхячейки. Модель складывания зоны. |
| 7 | **Использование Unix-подобных операционных систем**Основы работы с Unix-подобными операционными системами. Коммандная строка. Основные команды. Файловый менеджер. Подключение по ssh. Установка и компиляция программ из исходных кодов |
| 8 - 9 | **Использование программных пакетов, основанных на методе молекулярной динамики**Программный пакет Avogadro. Пакет cp2k. Оптимизация геометрии. Траектории движения |
| 10 - 14 | **Программные пакеты, основанные на теории функционала электронной плотности**Пакет ABINIT. Пакет PWSCF. Установка. Компиляция. Подготовка исходных файлов. Запуст расчета на классическом и кластерном компьютере. Моделирование зонной структуры материалов. Использование метода сверхячейки |
| 14 - 16 | **Исследование наносистем**Анализ результатов моделирования и сравнение с экспериментальными данными. Спектроскопия оптического поглощения. Связь с рассчетной плотностью электронных состояний. Спектроскопия фотолюминесценции. Ширина запрещенной зоны. Рассчетные электронные дисперсионные зависимости. Спектроскопия КР. Резонансные условия. Исследование зонной структуры материалов. |

5. Образовательные технологии

При освоении данной дисциплины основную роль играют аудиторные занятия в виде лекций и семинаров, а также самостоятельная работа студентов, заключающаяся в выполнении домашнего задания, повторения ранее пройденного материала.

6. ТРЕБОВАНИЯ К ФОНДУ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ В РАМКАХ РЕАЛИЗУЕМОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Курс "Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем" рассчитан на один семестр, преподается в 1-м семестре магистратуры и разделен на три раздела:

1. Теоретические основы моделирования

2. Вычислительные методы моделирования

3. Экспериментальные методы исследования наносистем

По завершении каждого раздела студентам будет предложено пройти Обязательный Текущий Контроль (ОТК), проводимый в виде теста.

По результатам ответов на вопросы теста студентам начисляются баллы.

Максимальное количество баллов, которые возможно набрать по окончанию первого, второго и третьего разделов - 20, 20 и 10 соответственно.

Тестовые задания приведены в Фонде Оценочных Средств по данной дисциплине, являющимся неотъемлемой частью учебно-методического комплекса учебной дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем»

На решение тестовых заданий студенту отводится 10 минут.

Если студент не набирает 50% баллов по результатам теста, то задание считается незасчитанным и у студента образуется долг, который должен быть закрыт в течение семестра или на зачетной неделе.

Таким образом, к экзамену студент может максимально набрать 50 баллов.

Экзамен проводится в виде ответов на вопросы экзаменационного билета. Максимальное время подготовки ответа - 1 час.

Экзаменационные вопросы и билеты приведены в Фонде Оценочных Средств по данной дисциплине, являющимся неотъемлемой частью учебно-методического комплекса учебной дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем»

По результатам экзамена студент может получить максимально 50 баллов.

Баллы, полученные за экзамен суммируются с баллами, полученными по результатам Обязательного Текущего Контроля.

Итого, максимальное количество баллов, которые может получить студент по данной дисциплине составляет 100.

Итоговая оценка промежуточного контроля по дисциплине определяется на основании набранных баллов по следующей таблице:

Отлично (A) - 90-100 баллов

Хорошо (D, C, B) - 70-89 баллов

Удовлетворительно (E, D) - 60-69 баллов

Неудовлетворительно (F) - менее 60 баллов

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

а) ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. ЭИ А 62 Вычислительные методы : , Москва: Лань", 2014

2. ЭИ И 15 Основы компьютерного моделирования наносистем : , Москва: Лань, 2010

3. ЭИ Д26 Описание программных пакетов для квантовых расчетов наносистем : учебное пособие для вузов, Н. Н. Дегтяренко, Москва: МИФИ, 2008

4. 004 Д26 Описание программных пакетов для квантовых расчетов наносистем : учебное пособие для вузов, Н. Н. Дегтяренко, Москва: МИФИ, 2008

5. 539.2 К45 Введение в физику твердого тела : , Ч. Киттель , М.: МедиаСтар, 2006

б) ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

в) ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

Специальное программное обеспечение не требуется

 8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Специальное материально-техническое обеспечение не требуется

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС НИЯУ МИФИ по направлению подготовки (специальности) 14.04.02 Ядерные физика и технологии.

Авторы:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Осадчий Александр Валентинович к.ф.-м.н. | \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_(подпись) |

Рецензент(ы):

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_(подпись) |