

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)»**

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы  
электроники, фотоники и  
молекулярной физики  
А.С. Батурин**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Квантово-химическое моделирование в наноэлектронике
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: электроника и квантовые технологии Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра микро- и наноэлектроники
<b>курс:</b>	2
<b>квалификация:</b>	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 3 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 15 час.

Всего часов: 45, всего зач. ед.: 1

Программу составил: В.С. Константинов

Программа обсуждена на заседании кафедры микро- и наноэлектроники 03.03.2023

## Аннотация

Курс "Квантово-химическое моделирование в нанoeлектронике" предусматривает изучение теоретических основ квантово-механического моделирования, освоение ключевого функционала программного пакета «Quantum Espresso» и формирование компетенций для его практического применения для задач нанoeлектроники.

### 1. Цели и задачи

#### Цель дисциплины

Курс "Квантово-химическое моделирование в нанoeлектронике" предусматривает изучение теоретических основ квантово-механического моделирования, освоение ключевого функционала программного пакета «Quantum Espresso» и формирование компетенций для его практического применения для задач нанoeлектроники.

#### Задачи дисциплины

- изучить теоретические основы теории функционала плотности и метода псевдопотенциалов;
- освоить работу с базами кристаллографических данных и псевдопотенциалов;
- научиться составлять, модифицировать и верифицировать кристаллографическое описание объемных структур, структур с поверхностью и/или нестехиометрического состава для входных файлов программного пакета «Quantum Espresso»;
- научиться выполнять расчёты самосогласованного поля, равновесной кристаллографической структуры и зонной структуры в программном пакете «Quantum Espresso» и с применением вспомогательных утилит;
- изучить перспективы применения методов квантово-механического моделирования в нанoeлектронике.

### 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- теоретические основы квантово-механического моделирования и область его применимости;
- основные функции программного пакета «Quantum Espresso»;
- перспективы применения методов квантово-механического моделирования в нанoeлектронике.

уметь:

- работать с базами кристаллографических данных и псевдопотенциалов;
- составлять, модифицировать и верифицировать кристаллографическое описание объемных структур, структур с поверхностью и/или нестехиометрического состава для входных файлов программного пакета «Quantum Espresso»;
- выполнять расчёты самосогласованного поля, равновесной кристаллографической структуры и зонной структуры в программном пакете «Quantum Espresso» и с применением вспомогательных утилит.

владеть:

- навыками интерпретации кристаллографического описания объемных структур, структур с поверхностью и/или нестехиометрического состава;
- навыками постановки экспериментов с применением квантово-механических расчётов;
- навыками обработки и интерпретации выходных данных, получаемых в программном пакете «Quantum Espresso».

#### 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

##### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Введение в квантово-механическое моделирование		2		1
2	От уравнения Шрёдингера к теории функционала плотности		2		1
3	Метод псевдопотенциалов и введение в программный пакет «Quantum Espresso»		2		1
4	Генерация входного файла для расчёта самосогласованного поля бездефектной объёмной структуры		2		1
5	Определение граничной энергии и размера импульсной сетки расчёта бездефектной объёмной структуры		2		1
6	Расчёт равновесного положения атомов в механически свободной кристаллографической бездефектной объёмной структуре		2		1
7	Расчёт равновесного положения атомов в механически напряжённой кристаллографической бездефектной объёмной структуре		2		1
8	Генерация файлов для расчёта зонной структуры бездефектного объёмного материала		2		1
9	Расчёт зонной структуры бездефектного объёмного материала		2		1
10	Генерация и верификация входного файла для структур с поверхностью		2		1
11	Определение минимальной толщины вакуума для расчёта структур с поверхностью		2		1
12	Определение граничной энергии и размера импульсной сетки расчёта структур с поверхностью		2		1
13	Генерация входного файла для расчёта самосогласованного поля нестехиометрической структуры		2		1
14	Определение граничной энергии и размера импульсной сетки расчёта нестехиометрической структуры		2		1

15	Расчёт равновесного положения атомов в механически свободной кристаллографической нестехиометрической структуре		2		1
Итого часов			30		15
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		45 час., 1 зач.ед.			

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

##### Семестр: 3 (Осенний)

##### 1. Введение в квантово-механическое моделирование

Предпосылки к разработке квантово-механического моделирования. Область применения квантово-механического моделирования. Перспективы использования квантово-механического моделирования в задачах современной нанoeлектроники.

##### 2. От уравнения Шрёдингера к теории функционала плотности

Основные свойства комплексных чисел. Базовые понятия квантовой механики: волновая функция и уравнение Шрёдингера. Гамильтониан нерелятивистской системы в приближении Борна-Оппенгеймера. Теорема Хоэнберга-Кона.

##### 3. Метод псевдопотенциалов и введение в программный пакет «Quantum Espresso»

Генерирование и анализ структуры файла кристаллографической информации в формате cif. Анализ структуры файла псевдопотенциалов. Генерирование, анализ структуры, модификация и верификация входного файла для расчёта самосогласованного поля в «Quantum Espresso».

##### 4. Генерация входного файла для расчёта самосогласованного поля бездефектной объёмной структуры

Понятие граничной энергии псевдопотенциалов. Расчёт самосогласованного поля для различных граничных энергий псевдопотенциалов в режиме «scf». Построение зависимости энергии от граничной энергии псевдопотенциалов и определение граничного значения. Понятие импульсной сетки. Определение импульсной сетки минимального размера.

##### 5. Определение граничной энергии и размера импульсной сетки расчёта бездефектной объёмной структуры

Особенности режимов «relax» и «vc-relax» для расчёта равновесного положения атомов. Верификация равновесной кристаллографической структуры.

##### 6. Расчёт равновесного положения атомов в механически свободной кристаллографической бездефектной объёмной структуре

Особенности режимов «relax» и «vc-relax» для расчёта равновесного положения атомов в механически напряжённых структурах. Задание параметров механического воздействия.

##### 7. Расчёт равновесного положения атомов в механически напряжённой кристаллографической бездефектной объёмной структуре

Особенности режимов «relax» и «vc-relax» для расчёта равновесного положения атомов в механически напряжённых структурах. Задание параметров механического воздействия.

8. Генерация файлов для расчёта зонной структуры бездефектного объёмного материала

Понятие точечной симметрии. Точки высокой симметрии.

9. Расчёт зонной структуры бездефектного объёмного материала

Особенности расчётов в режиме «bands». Построение зонной структуры. Определение ширины запрещённой зоны.

10. Генерация и верификация входного файла для структур с поверхностью

Особенности кристаллографического описания поверхности. Проверка симметрии файла с поверхностью.

11. Определение минимальной толщины вакуума для расчёта структур с поверхностью

Эффект взаимного влияния. Расчёт суммарной энергии структур с различной толщиной вакуума. Оценка минимальной толщины вакуума для исключения эффекта взаимного влияния поверхностей.

12. Определение граничной энергии и размера импульсной сетки расчёта структур с поверхностью

Особенности определения размера импульсной сетки для расчёта структур с поверхностью. Сравнение граничных энергий для объёмной структуры и структуры с поверхностью. Оценка поверхностной энергии.

13. Генерация входного файла для расчёта самосогласованного поля нестехиометрической структуры

Модификация и верификация входного файла для расчёта самосогласованного поля нестехиометрической структуры в «Quantum Espresso».

14. Определение граничной энергии и размера импульсной сетки расчёта нестехиометрической структуры

Сравнение граничных энергий и размера минимальной импульсной сетки для объёмной нестехиометрической структуры.

15. Расчёт равновесного положения атомов в механически свободной кристаллографической нестехиометрической структуре

Особенности режимов «relax» и «vc-relax» для расчёта равновесного положения атомов в механически свободной кристаллографической нестехиометрической структуре.

## **5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Аудитория, оснащённая компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система), доступ к многоядерному вычислительному комплексу с образом, содержащим программный комплекс «Quantum Espresso».

## **6. Перечень рекомендуемой литературы**

Основная литература

1. Сатанин А. М. Введение в теорию функционала плотности //Нижний Нов город: Нижегородский государственный университет им. НИ Лобачевского. – 2009.
2. Кон В. Электронная структура вещества-волновые функции и функционалы плотности //Успехи физических наук. – 2002. – Т. 172. – №. 3. – С. 336-348.

#### Дополнительная литература

1. Киселёв В. В. Квантовая механика. Курс лекций. – 2009.
2. Bartolotti L. J., Flurchick K. An introduction to density functional theory //Reviews in computational chemistry. – 2009. – Т. 7. – С. 187-216.

### **7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

Не используются

### **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

1. <https://www.quantum-espresso.org/>
2. <https://gitlab.com/QEF/q-e>
3. <https://materialsproject.org/>
4. <https://dev-www.materialscloud.org/home>
5. <https://www.cryst.ehu.es/>

### **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

### ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: электроника и квантовые технологии Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра микро- и нанoeлектроники
<b>курс:</b>	<u>2</u>
<b>квалификация:</b>	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 3 (осенний) - Дифференцированный зачет	
<b>Разработчик:</b>	В.С. Константинов

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Квантово-химическое моделирование в нанoeлектронике» обучающийся должен:

### знать:

- теоретические основы квантово-механического моделирования и область его применимости;
- основные функции программного пакета «Quantum Espresso»;
- перспективы применения методов квантово-механического моделирования в нанoeлектронике.

### уметь:

- работать с базами кристаллографических данных и псевдопотенциалов;
- составлять, модифицировать и верифицировать кристаллографическое описание объемных структур, структур с поверхностью и/или нестехиометрического состава для входных файлов программного пакета «Quantum Espresso»;
- выполнять расчёты самосогласованного поля, равновесной кристаллографической структуры и зонной структуры в программном пакете «Quantum Espresso» и с применением вспомогательных утилит.

### владеть:

- навыками интерпретации кристаллографического описания объемных структур, структур с поверхностью и/или нестехиометрического состава;
- навыками постановки экспериментов с применением квантово-механических расчётов;
- навыками обработки и интерпретации выходных данных, получаемых в программном пакете «Quantum Espresso».

## 3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлого занятия.

## 4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

1. Проблемы решения уравнения Шредингера многочастичной системы. Теорема Хознберга-Кона и теория функционала плотности.
2. Теория псевдопотенциалов. Приближение локальной плотности LDA и приближение градиентного приближения GGA псевдопотенциалов.
3. Понятие точечной симметрии. Точки высокой симметрии.
4. Основные расчётные утилиты «Quantum Espresso» и их назначение.
5. Алгоритм расчёта граничной энергии псевдопотенциалов и минимальной импульсной сетки.
6. Алгоритм расчёта равновесного положения атомов в механически свободной и механически напряжённой структурах.



7. Алгоритм расчёта зонной структуры и оценка ширины запрещённой зоны. Соотношение значений ширины запрещённой зоны, определённой методами квантово-механического моделирования и экспериментом и его обоснование.

8. Особенности квантово-механического моделирования структур с поверхностью и/или нестехиометрического состава. Способ оценки поверхностной энергии методами квантово-механического моделирования.

#### Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочётами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

#### **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

Оценка выставляется по результатам устного дифференцированного зачета. Опрос студента не должен превышать 60 минут.