

**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**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Квантовое моделирование наносистем
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: электроника и квантовые технологии Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра наноэлектроники и квантовых компьютеров
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 75 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: И.Ю. Катеев, кандидат наук, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры наноэлектроники и квантовых компьютеров 12.02.2024

Аннотация

Курс "Квантовое моделирование наносистем" предусматривает изложение принципов и методов компьютерного моделирования твердотельных наносистем, основанных на квантовании движения электронов и фотонов.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- изложение принципов и методов компьютерного моделирования твердотельных наносистем, основанных на квантовании движения электронов и фотонов.

Задачи дисциплины

- приобретение слушателями базовых знаний в области современных методов численного расчета квантовых устройств, выработка умения анализировать различные методы компьютерного моделирования на предмет выявления их преимуществ и недостатков;
- обучение слушателей принципам составления компьютерных программ, реализующих основные алгоритмы моделирования твердотельных систем;
- стимулирование самостоятельной работы слушателей с оригинальными работами, публикующимися в отечественных и зарубежных научных журналах.

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:

- основные алгоритмы компьютерного моделирования твердотельных систем, их преимущества и недостатки;
- принципы разработки компьютерных программ на современном программном обеспечении, реализующих основные алгоритмы моделирования твердотельных систем.

уметь:

- разрабатывать компьютерные программы, реализующих основные алгоритмы моделирования твердотельных систем;
- наглядно представлять полученные результаты с помощью современного графического программного обеспечения и мультимедийной аппаратуры;
- пользоваться необходимой учебной и научной литературой для решения задач квантовой теории информации.

владеть:

- основными методами компьютерного моделирования твердотельных систем;
- навыками использования современных программных средств для выполнения расчетов.

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	Моделирование транспорта электронов через резонансно-туннельные наноструктуры	6			15
2	Моделирование квантовомеханического поведения электронов в квантовых ямах и квантовых точках	6			15
3	Моделирование прохождения фотонов через полупроводниковые оптические наноструктуры	6			15
4	Моделирование спектра простейших одномерных оптических резонаторов	6			15
5	Моделирование спектра микродисков	6			15
Итого часов		30			75
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

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

Семестр: 2 (Весенний)

1. Моделирование транспорта электронов через резонансно-туннельные наноструктуры

1.1. Нахождение волновой функции электрона в резонансно-туннельной наноструктуре на основе решения уравнения Шредингера.

1.2. Вычисление зависимости коэффициента прохождения от энергии налетающих на структуру электронов.

1.3. Определение энергии резонансных уровней и их ширин в зависимости от параметров структуры.

2. Моделирование квантовомеханического поведения электронов в квантовых ямах и квантовых точках

2.1. Нахождение волновой функции электрона в квантовой яме (квантовой точке) на основе решения уравнения Шредингера.

2.2. Определение энергетического спектра квантовой ямы (квантовой точки) в зависимости от параметров структуры и приложенного к ней напряжения смещения.

3. Моделирование прохождения фотонов через полупроводниковые оптические наноструктуры

3.1. Нахождение электромагнитного поля в полупроводниковой оптической микроструктуре на основе решения уравнений Максвелла.

3.2. Вычисление зависимости коэффициента пропускания от длины волны налетающих на структуру фотонов.

3.3. Определение резонансных длин волн и добротности структуры в зависимости от ее параметров.

4. Моделирование спектра простейших одномерных оптических резонаторов

4.1. Нахождение электромагнитного поля в одномерном оптическом микрорезонаторе на основе решения уравнений Максвелла.

4.2. Определение оптического спектра резонатора в зависимости от его параметров.

5. Моделирование спектра микродисков

5.1. Нахождение электромагнитного поля в оптическом микродиске на основе решения уравнений Максвелла.

5.2. Определение оптического спектра микродиска в зависимости от его параметров.

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

учебная аудитория, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

6.Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

Литература выдается на кафедре:

1. Шампайн Л. Ф., Гладвел И., Томпсон С. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений с использованием MATLAB: Учебное пособие / Пер. с англ. Макарова И.А.. - СПб.: «Лань», 2009. - 304 стр.
2. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченкова Н.В. Вычислительные методы для инженеров. М.: Высшая школа, 1994 - 540 с.
3. Chiang K.C. Review of numerical and approximate methods for the modal analysis of general optical dielectric waveguides. Optical and Quantum Electronics. 1994. V. 26. P. S113.
4. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Изд-во МГУ, 1999.

Дополнительная литература

Литература выдается на кафедре:

1. К.А. Валиев, А.А. Кокин Физика полупроводниковых прибор микро- и нанoeлектроники. Гос.ком.РФ по высш.образов., Моск. физико-техн.ин-т. М., МФТИ, 1995

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

1. http://www.ph4s.ru/book_pc_chisl.html
2. <http://gen.lib.rus.ec/>
3. <http://arxiv.org>

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

На лекционных занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций.

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

Студент, прослушавший курс лекций, должен овладеть общим понятийным аппаратом и научиться применять теоретические знания на практике.

Успешное освоение курса требует:

- 1) посещения всех лекций, предусмотренных учебным планом; ведение конспектов занятий; активное участие в обсуждении лекций;
- 2) важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультацией к преподавателю на лекции.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: электроника и квантовые технологии Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра нанoeлектроники и квантовых компьютеров
курс:	<u>1</u>
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен	
Разработчик:	И.Ю. Катеев, кандидат наук, доцент

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 «Квантовое моделирование наносистем» обучающийся должен:

знать:

- основные алгоритмы компьютерного моделирования твердотельных систем, их преимущества и недостатки;
- принципы разработки компьютерных программ на современном программном обеспечении, реализующих основные алгоритмы моделирования твердотельных систем.

уметь:

- разрабатывать компьютерные программы, реализующих основные алгоритмы моделирования твердотельных систем;
- наглядно представлять полученные результаты с помощью современного графического программного обеспечения и мультимедийной аппаратуры;
- пользоваться необходимой учебной и научной литературой для решения задач квантовой теории информации.

владеть:

- основными методами компьютерного моделирования твердотельных систем;
- навыками использования современных программных средств для выполнения расчетов.

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 прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

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

Вопросы для подготовки к экзамену:

1. Моделирование транспорта электронов через резонансно-туннельные наноструктуры
2. Нахождение волновой функции электрона в резонансно-туннельной наноструктуре на основе решения уравнения Шредингера.
3. Вычисление зависимости коэффициента прохождения от энергии налетающих на структуру электронов.
4. Определение энергии резонансных уровней и их ширин в зависимости от параметров структуры.
5. Моделирование квантовомеханического поведения электронов в квантовых ямах и квантовых точках

6. Нахождение волновой функции электрона в квантовой яме (квантовой точке) на основе решения уравнения Шредингера.

7. Определение энергетического спектра квантовой ямы (квантовой точки) в зависимости от параметров структуры и приложенного к ней напряжения смещения.

8. Моделирование прохождения фотонов через полупроводниковые оптические наноструктуры

9. Нахождение электромагнитного поля в полупроводниковой оптической микроструктуре на основе решения уравнений Максвелла.

10. Вычисление зависимости коэффициента пропускания от длины волны налетающих на структуру фотонов.

11. Определение резонансных длин волн и добротности структуры в зависимости от ее параметров.

12. Моделирование спектра простейших одномерных оптических резонаторов

13. Нахождение электромагнитного поля в одномерном оптическом микрорезонаторе на основе решения уравнений Максвелла.

14. Определение оптического спектра резонатора в зависимости от его параметров.

15. Моделирование спектра микродисков

16. Нахождение электромагнитного поля в оптическом микродиске на основе решения уравнений Максвелла.

17. Определение оптического спектра микродиска в зависимости от его параметров.

в

Примеры экзаменационных билетов.

Пример 1.

1. Моделирование транспорта электронов через резонансно-туннельные наноструктуры
2. Моделирование квантовомеханического поведения электронов в квантовых ямах и квантовых точках

Пример 2.

1. Моделирование спектра простейших одномерных оптических резонаторов
2. Моделирование спектра микродисков

Критерии оценивания

10 баллов — (ПРЕВОСХОДНО):

- систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам учебной программы, а также по основным вопросам, выходящим за ее пределы;
- точное использование научной терминологии (в том числе на иностранном языке), стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы;
- безупречное владение инструментарием учебной дисциплины, умение его эффективно использовать в постановке и решении научных и профессиональных задач;
- выраженная способность самостоятельно и творчески решать сложные проблемы в нестандартной ситуации;
- полное и глубокое усвоение основной и дополнительной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- умение ориентироваться в теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им критическую оценку, использовать научные достижения других дисциплин;
- творческая самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, активное участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

9 баллов — (ОТЛИЧНО):

- систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам учебной программы;
- точное использование научной терминологии (в том числе на иностранном языке), стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его эффективно использовать в постановке и решении научных и профессиональных задач;

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

8 баллов — (ПОЧТИ ОТЛИЧНО):

- систематизированные, глубокие и полные знания по всем поставленным вопросам в объеме учебной программы;
- использование научной терминологии, стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы, умение делать обоснованные выводы;
- владение инструментарием учебной дисциплины (методами комплексного анализа, техникой информационных технологий), умение его использовать в постановке и решении научных и профессиональных задач; способность самостоятельно решать сложные проблемы в рамках учебной программы;
- усвоение основной и дополнительной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- умение ориентироваться в основных теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им критическую оценку с позиций государственной идеологии (по дисциплинам социально-гуманитарного цикла);
- активная самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, систематическое участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

7 баллов — (ОЧЕНЬ ХОРОШО):

- систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам учебной программы;
- использование научной терминологии (в том числе на иностранном языке), лингвистически и логически правильное изложение ответа на вопросы, умение делать обоснованные выводы;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его использовать в постановке и решении научных и профессиональных задач;
- усвоение основной и дополнительной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- умение ориентироваться в основных теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им критическую оценку;
- самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

6 баллов — (ХОРОШО):

- достаточно полные и систематизированные знания в объеме учебной программы;
- использование необходимой научной терминологии, стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы, умение делать обоснованные выводы;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его использовать в решении учебных и профессиональных задач; способность самостоятельно применять типовые решения в рамках учебной программы;
- усвоение основной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- умение ориентироваться в базовых теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им сравнительную оценку; активная самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, периодическое участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

5 баллов — (ПОЧТИ ХОРОШО):

- достаточные знания в объеме учебной программы;
- использование научной терминологии, стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы, умение делать выводы;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его использовать в решении учебных и профессиональных задач;
- способность самостоятельно применять типовые решения в рамках учебной программы;
- усвоение основной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- умение ориентироваться в базовых теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им сравнительную оценку;

- самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

4 балла — (УДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО), ЗАЧТЕНО:

- достаточный объем знаний в рамках образовательного стандарта;
- усвоение основной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- использование научной терминологии, стилистическое и логическое изложение ответа на вопросы, умение делать выводы без существенных ошибок;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его использовать в решении стандартных (типовых) задач;
- умение под руководством преподавателя решать стандартные (типовые) задачи;
- умение ориентироваться в основных теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им оценку;
- работа под руководством преподавателя на практических, лабораторных занятиях, допустимый уровень культуры исполнения заданий.

3 балла — (НЕУДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО), НЕЗАЧТЕНО:

- недостаточно полный объем знаний в рамках образовательного стандарта;
- знание части основной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- использование научной терминологии, изложение ответа на вопросы с существенными лингвистическими и логическими ошибками;
- слабое владение инструментарием учебной дисциплины, некомпетентность в решении стандартных (типовых) задач;
- неумение ориентироваться в основных теориях, концепциях и направлениях изучаемой дисциплины;
- пассивность на практических и лабораторных занятиях, низкий уровень культуры исполнения заданий.

2 балла — (НЕУДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО):

- фрагментарные знания в рамках образовательного стандарта;
- знания отдельных литературных источников, рекомендованных учебной программой дисциплины;
- неумение использовать научную терминологию дисциплины, наличие в ответе грубых стилистических и логических ошибок;
- пассивность на практических и лабораторных занятиях, низкий уровень культуры исполнения заданий.

1 балл — (НЕУДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО):

- отсутствие знаний и компетенций в рамках образовательного стандарта или отказ от ответа.

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

При проведении экзамена обучающемуся предоставляется 45 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету не должен превышать 60 минут