



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФГБОУ ВО «ИГУ»

Кафедра общей и экспериментальной физики



УТВЕРЖДАЮ

Декан физического факультета

/ Н.М. Буднев

2022 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

Наименование дисциплины (модуля) Б1.О.04 Методы математического моделирования

Направление подготовки 11.04.04 Электроника и наноэлектроника

Направленность (профиль) подготовки Измерение и модификация свойств наноматериалов и наноструктур

Квалификация выпускника - магистр

Форма обучения очная

Согласовано с УМК:
физического факультета
Протокол № 33 от «31» марта 2022 г.

Председатель: д.ф.-м.н., профессор
_____ Н.М.Буднев

Рекомендовано кафедрой:
общей и экспериментальной физики
Протокол № 6 от «24» марта 2022 г.

Зав.кафедрой д.ф.-м.н.
_____ / А.А.Гаврилюк

Иркутск 2022 г.

Содержание

I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ):	3
II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО	3
III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ	3
IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ	5
4.1. Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов	5
4.2. План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	6
4.3. Содержание учебного материала	8
4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ	9
4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение студентами в рамках самостоятельной работы (СРС)	9
4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	10
4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов)	10
V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)	10
VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) 12	
6.1. Учебно-лабораторное оборудование:	12
6.2. Программное обеспечение:	12
6.3. Технические и электронные средства:	12
VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ	12
VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ	13

I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ):

Курс «Методы математического моделирования» является не только прикладным направлением, позволяющим студентам освоить самостоятельные навыки моделирования структуры и свойств нанокomпонентов, но и необходимой составляющей формирования научного мировоззрения специалиста в области проектирования и модификации наноматериалов и наноструктур. Данный курс основан на углубленном изучении ключевых разделов квантовой теории строения вещества, знакомстве как с историей развития, так и с наиболее важными концепциями современной квантовой теории строения наноструктур, а также вычислительными методами и подходами в их моделировании.

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Методы математического моделирования» входит в модуль Б1.О.04 обязательной части Б1образовательной программы по направлению 11.04.04 «Электроника и наноэлектроника», профиль «Измерение и модификация свойств наноматериалов и наноструктур».

Для изучения данной учебной дисциплины (модуля) необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами: Молекулярная физика; Электричество и магнетизм; Колебания и волны. Оптика; Атомная физика; Математический анализ; Аналитическая геометрия; Линейная алгебра; Векторный и тензорный анализ; Дифференциальные уравнения; Интегральные уравнения и вариационное исчисление; Теория функции комплексного переменного; Квантовая механика.

III. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по данному направлению подготовки (специальности) 11.04.04 Электроника и наноэлектроника:

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
ОПК-4: способен разрабатывать и применять специализированное программно-	ИД-1.ОПК-4	Знать: методы расчета, проектирования, конструирования и модернизации электронной компонентной базы с использованием систем автоматизированного проектирования и

математическое обеспечение для проведения исследования и решения инженерных задач		компьютерных средств.
	ИД-2.ОПК-4	Уметь: осуществлять выбор наиболее оптимальных прикладных программных пакетов для решения соответствующих задач научной и образовательной деятельности.
	ИД-3.ОПК-4	Владеть: современными программными средствами моделирования, оптимального проектирования и конструирования приборов, схем и устройств электроники и наноэлектроники различного функционального назначения.

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов, в том числе 48 часов контактной работы.

Занятия проводятся только в очной форме обучения с применением дистанционного контроля самостоятельной работы студентов через ЭИОС факультета. Электронной и дистанционной форм обучения не предусматривается.

На практическую подготовку отводится 40 аудиторных часов (во время выполнения практических заданий).

Форма промежуточной аттестации: зачет.

4.1. Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/н	Раздел дисциплины/тема	Семестр	Всего часов	Из них практическая подготовка обучающихся	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, практическую подготовку и трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа	Форма текущего контроля успеваемости/ Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися		Консультация		
					Лекция	Семинар/ Практическое, лабораторное занятие			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	Раздел 1. Классификация и история методов математического моделирования структуры и свойств наноматериалов. Описание современных неэмпирических и полумэмпирических методов, их особенностей и возможностей использования.	2	20,1	8		8		12	Экспресс-опрос

2	Раздел 2. Математический аппарат, входящий в основу методов расчета структуры и свойств наноматериалов. Его место в теории применяемых подходов.	2	21,6	8		8		12	Экспресс-опрос, решение задач
3	Раздел 3. Изучение основных программных комплексов компьютерного моделирования наноструктур. Структура входных и выходных файлов. Способы задания параметров молекулярных систем для расчета необходимых свойств наноструктур.	2	21,6	8		8		12	Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий
4	Раздел 4. Углубленное изучение методов расчета наноструктур от базовых и используемых в качестве нулевого приближения (SCF) до комплексных высокого уровня точности (DFT, ADC, CCSD).	2	21,6	8		8		12	Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий
5	Раздел 5. Использование изученных методов и программных комплексов для решения ряда практических задач моделирования наноструктур.	2	21,6	8		8		12	Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий
	зачет	2	1,5						зачет
	Итого часов		108	40		40		60	

4.2. План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Трудоемкость (час.)		

3	Раздел 1. Классификация и история методов математического моделирования структуры и свойств наноматериалов. Описание современных неэмпирических и полумэмпирических методов, их особенностей и возможностей использования.	Самостоятельное повторение и изучение дополнительной информации по теме раздела	В начале семестра	11,5	Экспресс-опрос	Вся рекомендуемая литература
3	Раздел 2. Математический аппарат, входящий в основу методов расчета структуры и свойств наноматериалов. Его место в теории применяемых подходов.	Самостоятельное решение задач	В течение семестра	12	Экспресс-опрос, решение задач	
3	Раздел 3. Изучение основных программных комплексов компьютерного моделирования наноструктур. Структура входных и выходных файлов. Способы задания параметров молекулярных систем для расчета необходимых свойств наноструктур.	Самостоятельное изучение дополнительной информации по теме раздела, составление образцов входных файлов	В течение семестра	12	Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий	
3	Раздел 4. Углубленное изучение методов расчета наноструктур от базовых и используемых в качестве нулевого приближения (SCF) до комплексных высокого уровня точности (DFT, ADC, CCSD).	Самостоятельное изучение дополнительной информации по теме раздела	В течение семестра	12	Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий	
3	Раздел 5. Использование изученных методов и программных комплексов для решения ряда практических задач моделирования наноструктур.	Самостоятельное составление рабочих примеров расчета различных свойств наноструктур	В течение семестра	12	Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий	
3	Все темы	Работа с методическими материалами. Подготовка к зчету	К концу семестра	0,5	Опрос	
Общий объем самостоятельной работы по дисциплине (час)				60		

4.3. Содержание учебного материала

Раздел 1.

Классификация и история методов математического моделирования структуры и свойств наноматериалов. Модели качественного уровня, полуэмпирические методы, неэмпирические методы, комбинированные подходы.

Современные неэмпирические и полуэмпирические методы: SCF, DFT, ADC, CCSD, CI. Их особенности и возможности использования.

Раздел 2.

Математический аппарат, входящий в основу методов расчета структуры и свойств наноматериалов. Его место в теории применяемых подходов: применение понятий эрмитового сопряжения, диагонализации матричных операторов, ортонормированного базиса. Смысл собственных значений и собственных функций задачи на собственные значения в теории расчета свойств наноструктурных систем.

Раздел 3.

Изучение основных программных комплексов компьютерного моделирования наноструктур: Gaussian, Gamess, Q-Chem. Структура входных (входная геометрия, базисные наборы, ключевые слова) и выходных файлов. Способы задания параметров молекулярных систем для расчета необходимых свойств наноструктур: использование различных ключевых слов для решения ряда практических задач.

Раздел 4.

Углубленное изучение методов расчета наноструктур от базовых и используемых в качестве нулевого приближения (SCF) до комплексных высокого уровня точности (DFT, ADC, CCSD). Подробное изучение структуры методов, используемых в них приближений, особенностей расчета с их использованием.

Раздел 5.

Использование изученных методов и программных комплексов для решения ряда базовых практических задач моделирования наноструктур: расчет структуры наночастиц и молекулярных комплексов, потенциалов ионизации и сродства к электрону, дипольных моментов, ширины запрещенной зоны, спектров излучения и поглощения.

Освоение комплексного применения полученных навыков для глобального изучения свойств наноструктур.

4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

№ п/п	№ раздела и темы	Наименование практических занятий	Трудоемкость (час.)		Оценочные средства	Формируемые компетенции (индикаторы)*
			всего часов	из них практ. подг.		
1	2	3	4	5	6	7
1	Раздел 1	Классификация и история методов	20,1	8	Экспресс-опрос	ОПК-4
2	Раздел 2	Математический аппарат квантовой теории строения вещества	21,6	8	Экспресс-опрос, решение задач	ОПК-4
3	Раздел 3	Основные программные комплексы компьютерного моделирования наноструктур	21,6	8	Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий	ОПК-4
4	Раздел 4	Углубленное изучение методов расчета наноструктур	21,6	8	Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий	ОПК-4
5	Раздел 5	Практическое использование методов	21,6	8	Экспресс-опрос выполнение контрольных заданий	ОПК-4

4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение студентами в рамках самостоятельной работы (СРС)

№ нед.	Тема	Вид самостоятельной работы	Задание	Рекомендуемая литература	Количество часов
1	Классификация и история методов	Экспресс-опрос	Из открытых источников найти другие аналогичные методы, распределив по изученной классификации с пояснениями	Вся рекомендуемая литература	11,5
2-5	Математический аппарат квантовой теории строения вещества	Экспресс-опрос, решение задач	Решение комплекта домашних задач	Вся рекомендуемая литература	12

6-9	Основные программные комплексы компьютерного моделирования наноструктур	Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий	Из открытых источников найти инструкцию к предлагаемому в задании программному комплексу	Вся рекомендуемая литература	12
10-14	Углубленное изучение методов расчета наноструктур	Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий	Составить ряд структурных элементов входных файлов по заданию	Вся рекомендуемая литература	12
16-17	Практическое использование методов	Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий	Составить ряд примеров входных файлов, применимых для решения практических задач	Вся рекомендуемая литература	12

4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа реализуется:

- 1) Непосредственно в процессе аудиторных занятий, при выполнении практических работ.
- 2) В контакте с преподавателем вне рамок расписания - на консультациях по учебным вопросам, в ходе творческих контактов, при ликвидации задолженностей, при выполнении индивидуальных заданий и т.д.
- 3) В библиотеке, дома, в общежитии, на кафедре при подготовке к аудиторным занятиям по темам, вынесенным на самостоятельное изучение, и при изучении научной и специальной учебной литературы.

Самостоятельная работа студентов может быть как в аудитории, так и вне ее. Внеаудиторная самостоятельная работа студентов также включает в себя подготовку к устным опросам по каждому из изучаемых разделов. Также самостоятельная работа подразумевает систематический подход к обучению, в соответствии с предложенным в разделе 4.1 графиком, что, в свою очередь, способствует получению зачета по данной дисциплине.

4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовые работы учебным планом не предусмотрены

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

а) основная литература

- 1) Барановский В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия: учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений / В.И. Барановский.– М.: Издательский центр "Академия",

2008.– 384 с.

2) Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Учебное пособие. / В.Г.Цирельсон.– М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 495 с.

3) В.И. Барановский, Квантовая механика и квантовая химия.– М.: Лань, 2019.– 426 с.

4) В.И. Барановский, Квантовая механика и квантовая химия.– М.: Академия, 2008.– 384 с.

б) дополнительная учебная литература:

5) А.Б. Трофимов, Введение в квантовую химию: учеб. пособие.- Иркутск: Изд-во ИГУ, 2013.– 192 с.

6) Гельфанд И.М. Лекции по линейной алгебре / И.М. Гельфанд.– М.: Наука, 1971.– 272 с.

7) Маррел Дж. Химическая связь / Дж. Маррел, С. Кеттл, Дж. Теддер.– М.: Мир, 1980.– 382 с.

8) Р.Пантел, Г.Путхоф. Основы квантовой электроники. – М. «Мир», 1972.

в) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", полезных для освоения дисциплины

9) НБ ИГУ <http://library.isu.ru/ru>

10) ЭЧЗ «Библиотех» <https://isu.bibliotech.ru/>

11) ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com/>

12) ЭБС «Рукопт» <http://rucont.ru>

13) ЭБС «Айбукс» <http://ibooks.ru>

VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Практические занятия по данной дисциплине проводятся в учебной аудитории по расписанию. Лабораторное оборудование не предусмотрено.

На факультете имеется компьютеризированная аудитория, предназначенная для самостоятельной работы, с неограниченным доступом в Интернет, стандартные средствами просмотра презентаций и других материалов по курсу.

6.2. Программное обеспечение:

Стандартные сервисы сети Интернет, программные комплексы расчетов молекулярных систем с открытым доступом (Gauss), стандартные средства просмотра презентаций и других материалов по курсу, стандартные программы для построения графиков, таблиц и проведения расчётов.

6.3. Технические и электронные средства:

Для проведения практических занятий в качестве демонстрационного оборудования используются проектор, экран и меловая доска. Используются современные образовательные технологии: информационные (лекции и презентации в PowerPoint), проектные (мультимедиа, видео). Использование глобальной компьютерной сети позволяет обеспечить доступность Интернет-ресурсов и реализовать самостоятельную работу студентов, в ходе которой они могут вычитывать научные статьи по темам курса. На лекциях могут использоваться мультимедийные средства: проектор (CASIO XJ-A241), переносной экран (ClassicSolution, T195x195/1MW-LU/B), ноутбук Lenovo B590. На факультете имеется компьютеризированная аудитория, предназначенная для самостоятельной работы, с неограниченным доступом в Интернет.

VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Классические практические занятия, экспресс-опросы.

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Фонд оценочных средств (ФОС) представлен в приложении.

Оценочные материалы для входного контроля:

Проводится опрос на первом занятии.

Оценочные материалы текущего контроля:

Содержание учебного материала разделено на дидактические единицы (ДЕ) – предметные темы, подлежащие обязательному изучению и усвоению в процессе обучения. Учитывается промежуточная аттестация по итогам самостоятельной работы, предусмотренной программой курса.

Оценочные материалы для промежуточной аттестации:

Примерный список вопросов к зачету:

- 1) Гамильтониан системы в общем виде и формулы для его компонентов многоэлектронной системы.
- 2) Вывод и решение уравнения Шредингера для простейшей системы.
- 3) Представление электронной системы по Шредингеру и Максуд Борну.
- 4) Матричное представление Гейзенберга в современных методах квантовой теории строения вещества.
- 5) Классификация методов расчета структуры и свойств молекулярных систем.
- 6) Примеры классических неэмпирических методов, используемых в современное время.
- 7) Эрмитово сопряжение. Ортонормированный базис. Оператор. Задача на собственные значения. Роль этих понятий в методах расчета наноструктур.
- 8) Структура входного и выходного файла стандартных программных комплексов, используемых для расчета нанообъектов.
- 9) Базисный набор, его представления. Поляризационные и диффузные функции.
- 10) Построение Z-матрицы.
- 11) Оптимизация структурных параметров.
- 12) Основные особенности методов Хартри-Фока (RHF, UHF, ROHF), MP2, DFT, CI, ADC, CCSD.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 11.04.04 Электроника и наноэлектроника.

Разработчик:

к.х.н. А.М. Белоголова

Программа рассмотрена на заседании кафедры общей и экспериментальной физики
«24» марта 2022 г.

Протокол № 6

Зав.кафедрой  д.ф.-м.н. Гаврилюк А.А.

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.