

## Рабочая программа дисциплины

### 1. Численные методы в физике наноструктур

#### 2. Лекторы.

**2.1.** к.ф.-м.н., старший преподаватель, Колесников Сергей Владимирович, кафедра общей физики физического факультета МГУ, [kolesnikov@physics.msu.ru](mailto:kolesnikov@physics.msu.ru), 8-495-9394590.

#### 3. Аннотация дисциплины.

Физика наноструктур сталкивается с принципиально многочастичными задачами. Эти задачи за редким исключением не могут быть решены аналитически. Поэтому основные успехи в теоретическом исследовании наноструктур связаны с применением численных методов. В предлагаемом учебном курсе обсуждаются наиболее популярные современные методы численного решения задач физики наноструктур, такие как метод молекулярной динамики, классические и квантовые методы Монте-Карло, теория функционала электронной плотности, метод гриновских функций Корринги, Кона и Ростокера. Учебный курс состоит из семнадцати лекций, посвященным теоретическим основам вышеперечисленных методов и их применению к конкретным задачам.

#### 4. Цели освоения дисциплины.

Овладеть базовыми теоретическими знаниями необходимыми для численного исследования свойств наноструктур. Изучить наиболее распространенные и эффективные на сегодняшний день теоретические модели и области их применения.

#### 5. Задачи дисциплины.

Изучение теоретических основ наиболее эффективных методов компьютерного моделирования свойств наноструктур. Получение базовых знаний об области применения и точности различных теоретических подходов. Получение практических навыков решения простейших задач, допускающих аналитическое решение.

#### 6. Компетенции.

##### 7.1. Компетенции, необходимые для освоения дисциплины.

М-ПК-1

##### 7.2. Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины.

М-ОНК-1, М-ОНК-2, М-ИК-3, М-ПК-1, М-ПК-2, М-ПК-3, М-СПК-1, М-СПК-8

#### 7. Требования к результатам освоения содержания дисциплины

В результате освоения дисциплины студент должен знать теоретические основы наиболее распространенных методов численного исследования свойств наноструктур и пределы их применимости; уметь самостоятельно выбрать адекватный метод решения конкретной научной задачи; владеть навыками работы с математическим аппаратом физических теорий, необходимыми для дальнейшего их изучения; иметь опыт деятельности в решении простейших задач, имеющих аналитическое решение.

#### 8. Содержание и структура дисциплины.

Вид работы	Семестр	Всего
	2	
<b>Общая трудоёмкость, акад. часов</b>	72	72
<b>Аудиторная работа:</b>	34	34
Лекции, акад. часов	17	17
Семинары, акад. часов	17	17
Лабораторные работы, акад. часов	-	-
<b>Самостоятельная работа, акад. часов</b>	38	38
<b>Вид итогового контроля (зачёт, зачёт с оценкой, экзамен)</b>	зачет	зачет

№ раз-дела	Наименование раздела	Трудоёмкость (академических часов) и содержание занятий			Форма текущего контроля	
		Аудиторная работа				Самостоятельная работа
		Лекции	Семинары	Лабораторные работы		
1	Общие принципы моделирования наноструктур	1 час. Общие принципы моделирования наноструктур. Невозможность практического использования многочастичной волновой функции. Катастрофа Ван-Флека.	1 час. Оценка точности построения приближенной многочастичной волновой функции и последующего хранения её в памяти компьютера.		Об, Оп	
2	Метод молекулярной динамики	1 час. Метод молекулярной динамики. Численное интегрирование уравнений движения. Способы задания начальных и граничных условий.	1 час. Метод молекулярной динамики. Простой и скоростной алгоритмы Верле. Метод перескока. Метод молекулярной статистики. Обрезка потенциалов.		2 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач на тему численное интегрирование уравнения движения. Сравнение различных численных схем.	
		1 час. Метод молекулярной динамики при постоянной температуре. Вычисление мгновенной температуры системы. Общие принципы термостатирования.	1 час. Примеры термостатов. Метод масштабирования. Броуновская динамика. Термостат Берендсена. Термостат Нозе-Гувера.		3 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач на тему термостаты. Вывод термостата Берендсена из броуновской динамики.	ДЗ, Об, Оп
		1 час. Межатомные потенциалы для молекулярных, ионных, ковалентных и металлических кристаллов.	1 час. Методы подгонки свободных коэффициентов межатомных потенциалов.		2 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач на вычисление физических характеристик молекулярных и ионных кристаллов.	
3	Методы Монте-Карло	1 час. Классические методы Монте-Карло. Теоретические основы методов Монте-Карло. Вычисление средних значений по каноническому ансамблю. Принцип детального равновесия.	1 час. Алгоритм Метрополиса. Кинетический метод Монте-Карло. Вычисление диффузионных барьеров и предэкспоненциальных факторов.		3 часа. Работа с лекционным материалом. Вывод уравнения кинетического баланса. Решение задач на вычисление диффузионных барьеров и коэффициентов диффузии.	
		1 час. Квантовые методы Монте-Карло. Спиновый гамльтониан и модель Гейзенберга. Применение метода Монте-Карло к модели Гейзенберга.	1 час. Применение спинового метода Монте-Карло к задаче об одномерном ферромагнетизме (антиферромагнетизме).		2 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач на тему спиновые волны в одномерной модели Гейзенберга.	
4	Простейшие квантово-механические методы	1 час. Метод сильной связи. Общая формулировка.	1 час. Применение метода сильной связи к случаю зоны, порождаемой одним атомным уровнем. Межатомные потенциалы для d-металлов.		3 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач на нахождение зонной структуры кристаллов в рамках метода сильной связи.	ДЗ, Об, Оп

		1 час. Однородный электронный газ. Средняя энергия и давление. Электронный газ во внешнем поле. Вариационный формализм.	1 час. Уравнение Томаса-Ферми. Решение уравнения Томаса-Ферми для нейтрального атома.		2 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач на вычисление средних характеристик однородного электронного газа.	
		1 час. Детерминанты Слэтера и их свойства. Энергия обменного взаимодействия. Уравнения Хартри-Фока.	1 час. Вывод уравнений Хартри-Фока из вариационного принципа. Применение уравнений Хартри-Фока к системе свободных электронов.		3 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач на применение уравнений Хартри-Фока к однородному электронному газу.	
5	Теория функционала электронной плотности	1 час. Основы теории функционала электронной плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона. Метод Кона-Шэма.	1 час. Вывод уравнений Кона-Шэма в приближении локальной плотности. Обменно-корреляционный функционал.		2 часа. Работа с лекционным материалом. Вычисление энергии обменного взаимодействия в однородном электронном газе.	ДЗ, Об, Оп
		1 час. Спин-поляризованная теория функционала электронной плотности. Обменно-корреляционная дырка. Общая схема первопринципной молекулярной динамики.	1 час. Теорема Гелл-Мана-Фейнмана. Теорема о вирiale в квантовой механике. Теорема о вирiale в приближении локальной плотности. Вычисление сил и давлений.		2 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач на доказательство и применение теоремы Гелл-Мана-Фейнмана и теоремы о вирiale в рамках приближения локальной плотности.	
6	Метод гриновских функций Корринги, Кона и Ростокера	1 час. Функция Грина уравнения Шредингера. Связь электронной плотности и плотности состояний с функцией Грина. Координатное и импульсное представления функции Грина.	1 час. Вычисление функция Грина свободной частицы в одномерном и трехмерном случае. Условия излучения Зоммерфельда.		3 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач на нахождение функций Грина уравнения Шредингера в трехмерном случае, вычисление плотности состояний и электронной плотности.	ДЗ, Об, Оп
		1 час. Собственные функции оператора момента импульса. Разложение плоской волны по сферическим функциям Бесселя.	1 час. Функция Грина свободной частицы в представлении углового момента. Плотность состояний.		2 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач вычисление функции Грина уравнения Шредингера в представлении углового момента.	
		1 час. Функция Грина взаимодействующей частицы. Уравнение Дайсона. Уравнение Липмана-Швингера.	1 час. T-матрица. Свойства t-матрицы. Оптическая теорема для t-матрицы.		2 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач на нахождение функций Грина взаимодействующих частиц.	
		1 час. Рассеяние на сферически симметричном потенциале. Амплитуда рассеяния.	1 час. Нормировка волновой функции. Вычисление t-матрицы в случае рассеяния на сферически симметричном потенциале.		3 часа. Работа с лекционным материалом. Решение задач на асимптотические свойства частиц рассеянных на сферически симметричном потенциале и на асимптотические свойства t-матрицы.	

	<p><i>1 час.</i> Трансляция сферических функций. Структурные факторы. Основы метода гриновских функций Корринги-Кона-Ростокера (ККР).</p>	<p><i>1 час.</i> ККР для МТ-потенциалов. Уравнение движения для Т-матрицы. Секулярное уравнение.</p>		<p><i>2 часа.</i> Работа с лекционным материалом. Решение задач на трансляцию сферических функций. Вывод секулярного уравнения из уравнения Липмана-Швингера.</p>	
	<p><i>1 час.</i> Электронная структура твердых тел. Самосогласованное вычисление электронной плотности. Первопринципная молекулярная динамика на основе метода ККР.</p>	<p><i>1 час.</i> Уравнение движения для Т-матрицы в представлении углового момента. Функция Грина частицы, взаимодействующей с системой МТ-сфер.</p>		<p><i>2 часа.</i> Работа с лекционным материалом. Решение задач на использование математического аппарата метода ККР функций Грина в приближении МТ-потенциалов.</p>	

**Предусмотрены следующие формы текущего контроля успеваемости:**

- Домашнее задание (ДЗ),
- Обсуждение (Об),
- Опрос (Оп).

## **9. Место дисциплины в структуре ООП ВПО**

1. Обязательная дисциплина.
2. Вариативная часть, профессиональный блок.
3. Дисциплина является теоретическим базисом к овладению современными методами численного расчета физических свойств наноструктур. Дисциплина дополняет дисциплины из ООП, посвященные квантовой физике, физике конденсированного состояния, физике магнитных явлений.
  - 3.1. Дисциплины и практики, которые должны быть освоены для начала освоения данной дисциплины:
    - дисциплины "Математический анализ", "Линейная алгебра", "Дифференциальные уравнения", "Интегральные уравнения и вариационное исчисление" из блока Б-ОН базовой части ООП ВПО,
    - дисциплины "Введение в квантовую физику", "Методы математической физики", "Квантовая теория" из блока Б-ПРОФ базовой части ООП ВПО.
  - 3.2. Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Научно-исследовательская работа из блока "Научно-исследовательская работа" и выпускная квалификационная работа по направлению "Физика" из блока "Итоговая государственная аттестация".

## **10. Образовательные технологии**

Образовательные технологии, используемые при реализации различных видов учебной работы и дающие наиболее эффективные результаты освоения дисциплины:

- дискуссии,
- консультации
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ,

## **11. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации**

Текущая аттестация проводится еженедельно. Критерии формирования оценки – посещаемость занятий, активность студентов на лекциях и семинарах, восприятие излагаемого материала, выполнение домашних заданий.

Полный перечень вопросов к зачету:

1. Метод молекулярной динамики. Численное интегрирование уравнений движения. Способы задания начальных и граничных условий. Термостаты.
2. Межатомные потенциалы для молекулярных, ионных, ковалентных и металлических кристаллов. Методы подгонки свободных коэффициентов межатомных потенциалов.
3. Классические методы Монте-Карло. Теоретические основы методов Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса. Кинетический метод Монте-Карло.
4. Взаимодействие электронов и магнитная структура. Спиновый гамильтониан и модель Гейзенберга. Основное состояние ферромагнетика и антиферромагнетика. Применение метода Монте-Карло к модели Гейзенберга.
5. Метод сильной связи. Общая формулировка. Применение к случаю зоны, порождаемой одним атомным уровнем. Межатомные потенциалы, обоснованные в рамках метода сильной связи.
6. Однородный электронный газ. Средняя энергия и давление. Электронный газ во внешнем поле. Вариационный формализм. Уравнение Томаса-Ферми.

7. Детерминанты Слэтера и их свойства. Энергия обменного взаимодействия. Уравнения Хартри-Фока. Применение уравнений Хартри-Фока к системе свободных электронов.
8. Основы теории функционала электронной плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона. Метод Кона-Шэма. Приближение локальной плотности. Обменно-корреляционный функционал.
9. Спин-поляризованная теория функционала электронной плотности. Обменно-корреляционная дырка. Теорема Гелл-Мана-Фейнмана. Теорема о вириале. Вычисление сил и давлений
10. Функция Грина уравнения Шрёдингера. Связь электронной плотности с функцией Грина. Функция Грина свободной частицы. Координатное и импульсное представления функции Грина.
11. Разложение плоской волны по сферическим функциям Бесселя. Функция Грина свободной частицы в представлении углового момента. Плотность состояний.
12. Функция Грина взаимодействующей частицы. Уравнение Дайсона. T-матрица. Оптическая теорема.
13. Рассеяние на сферически симметричном потенциале. Амплитуда рассеяния. Нормировка волновой функции. Свойства T-матрицы. Трансляция сферических функций.
14. Основы метода гриновских функций Корринги-Кона-Ростокера (ККР). ККР для МТ-потенциалов. Электронная структура твердых тел. Самосогласованное вычисление электронной плотности.

## 12. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

### Основная литература

1. Д.В. Хеерман, Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике, М. «Наука», 1990.
2. M.E.J. Newman, G.T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Oxford University Press, 2001.
3. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, Физика твердого тела: В двух томах / М.И Каганов, М.: Мир, 1979.
4. A. Gonis, Theoretical materials science: Tracing the electronic origin of materials behavior, Materials Research Society, 2000.

### Дополнительная литература

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теоретическая физика. Квантовая механика. т.3. М., Наука, 1989.
2. С. Лундквист, Н. Марч, Теория неоднородного электронного газа, М. «Мир», 1987.
3. J. Zabloudil, R. Hammerling, L. Szunyogh, P. Weinberger, Electron Scattering in Solid Matter. A Theoretical and Computational Treatise, Springer, 2005.

### Периодическая литература

1. W.M.C. Foulkes, L. Mitas, R.J. Needs, G. Rajagopal, Quantum Monte Carlo simulations of solids, Rev. Mod. Phys. **73**, 33 (2001).
2. H. Ebert, D. Ködderitzsch, J. Minar, Calculation condensed matter properties using KKR-Green's function method – recent developments and applications, Rep. Prog. Phys. **74**, 096501 (2011).
3. В. Кон, Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности, УФН **172**, №3, стр. 337 (2002).
4. W.G. Hoover, A.J.C. Ladd, B. Moran, High-Strain-Rate Plastic Flow Studied via Nonequilibrium Molecular Dynamics, Phys. Rev. Lett. **48**, 1818 (1982).
5. H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren, A. DiNola, J.R. Haak, Molecular dynamics with coupling to an external bath, J. Chem. Phys. **81**, 3684 (1984).

6. S. Nose, A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble, *Molecular Physics* **52**, 255 (1984).
7. W.G. Hoover, Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions, *Phys. Rev. A* **31**, 1695 (1985).
8. R.P. Gupta, Lattice relaxation at a metal surface, *Phys. Rev. B* **23**, 6265 (1981).

### **13. Материально-техническое обеспечение**

В соответствии с требованиями п.5.3. образовательного стандарта МГУ по направлению подготовки «Физика».

Лекции по дисциплине проводятся в аудитории им. А.Н. Матвеева (комн. 4-30) физического факультета. Лекционная аудитория обеспечена проекционным оборудованием и компьютером.