



ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ В КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Третій (освітньо-науковий)</i>
Галузь знань	<i>10 Природничі науки</i>
Спеціальність	<i>104 Фізика та астрономія</i>
Освітня програма	<i>Фізика</i>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>Очна (денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>2 курс, осінній семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>3 кредита/90 годин</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік МКР</i>
Розклад занять	<i>час і місце проведення аудиторних викладені на сайті http://rozklad.kpi.ua/</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лекції, практичні заняття: доктор фізико-математичних наук, професор Горшков В'ячеслав Миколайович, e-mail: vn.gorshkov@gmail.com</i>
Розміщення курсу	<i>Електронний кампус КПІ ім. Ігоря Сікорського</i>

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Докорінні зміни в сфері високих технологій - електроніці, інформаційних технологіях, мікромеханіки - пов'язані з фундаментальними і прикладними дослідженнями, конструюванням і практичним використанням матеріалів і пристроїв, елементи яких мають розміри менше 100 нанометрів. Такі нано-об'єкти мають принципово нові фізичні властивості, які зумовлюють унікальні експлуатаційні характеристики прикладних розробок, створених на базі інтеграції багатьох «первинних» нанорозмірних елементів. В свою чергу, досягнення сучасної науки відкрили можливості керованого синтезу цих первинних нано-об'єктів з наперед заданими/бажаними фізичними властивостями. В значній мірі ці можливості пов'язані з чисельним моделюванням динаміки систем з багатьох тисяч атомів, що забезпечено постійно зростаючими обчислювальними ресурсами сучасних ЕВМ.

Пакети вже розроблених командами науковців/програмістів відповідних програм значно полегшують проведення досліджень в світі нано-об'єктів. Запропонований учбовий курс знайомить з принципами, які закладені в основи громіздких квантово-механічних обчислень та дає початкові навички використання цих пакетів при вирішенні тренувальних завдань.

Програмні результати навчання:

Компетентності:

(ФК01) здатність виконувати оригінальні дослідження, досягати наукових результатів, які створюють нові знання в фізиці наносистем та дотичних до них міждисциплінарних напрямках і

можуть бути опубліковані у провідних наукових виданнях з магнетизму та суміжних галузей; (ФК05) здатність створювати теоретичні моделі фізичних процесів у відповідності до вимог поставленої задачі.

Знання:

(ПРН01) передові концептуальні та методологічні знання з фізики нано-об'єктів і на межі предметних галузей, а також дослідницькі навички, достатні для проведення наукових і прикладних досліджень на рівні останніх світових досягнень з відповідного напрямку, отримання нових знань та/або здійснення інновацій.

Уміння:

(ПРН03) формулювати і перевіряти гіпотези; використовувати для обґрунтування висновків належні докази, зокрема, результати теоретичного аналізу, експериментальних досліджень і математичного та/або комп'ютерного моделювання, наявні літературні дані;

(ПРН04) розробляти та досліджувати концептуальні, математичні і комп'ютерні моделі процесів і систем, ефективно використовувати їх для отримання нових знань та/або створення інноваційних продуктів у фізиці та дотичних міждисциплінарних напрямках;

(ПРН05) планувати і виконувати експериментальні та/або теоретичні дослідження з фізики та дотичних міждисциплінарних напрямків з використанням сучасних інструментів, критично аналізувати результати власних досліджень і результати інших дослідників у контексті усього комплексу сучасних знань щодо досліджуваної проблеми.

При засвоєнні матеріалу дисципліни аспіранти отримають досвід побудови складних математичних моделей для дослідження багаточастинкових систем. Рідко, яка фізична проблема має точне вирішення. В кожному конкретному випадку перед дослідником стоїть задача вибору різного роду наближень, які не повинні значно спотворювати кінцевий результат. Відповідно до цих наближень будується (або обирається) математична модель явища (пакет програм), яка забезпечить і точність результату, і фізичну реальність часу обчислень. Важливою є також проблема цілеспрямованого вибору фізичних параметрів, які керують динамікою досліджуваної системи у бажаному напрямку. Вибір оптимальних параметрів базується на чіткій якійсь уяві про взаємодію різних взаємопов'язаних факторів, які визначають хід фізичного процесу в цілому. Дати відповідний досвід в вирішенні перелічених вище проблем (загальних для багатьох розділів фізики) – ціль представленого курсу. Крім того, якщо мова йде про наносистеми, аспіранти отримають поглиблені знання з квантової механіки багаточастинкових систем, що є конче корисним в вирішенні самих різних задач сучасної фізики.

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Вивчення даної дисципліни базується на дисциплінах «Фізика твердого тіла», «Термодинаміка і статистична фізика», «Квантова механіка» першого рівня вищої освіти. Необхідні також знання вищої математики та досвід математичного моделювання і програмування, який здобувачі отримали під час навчання на 1 – 4 курсах бакалаврату та в магістратурі. Необхідним також є базовий рівень володіння англійською мовою для читання посібників та оригінальних наукових статей в англомовних журналах.

Знання, отримані аспірантами з дисципліни «Чисельні методи в квантовій механіці», використовуються при підготовці аспірантами наукових доповідей та наукових статей, а також при захисті дисертації.

3. Зміст навчальної дисципліни

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 90 годин/ 3 кредити ECTS.

Рекомендований розподіл навчального часу

Форма навчання	Всього		Розподіл навчального часу за видами занять					Семестрова атестація
	кредитів	годин	Лекції	Практичні (семінарські) заняття	СРС			
					Підготовка до заліку	МКР	Підготовка до занять	
Денна	3	90	14	12	12	10	42	Залік

Дисципліна «Чисельні методи в квантовій механіці» включає наступні теми:

Тема 1. Загальні принципи побудови математичної моделі фізичного процесу, характеристика моделей різних типів в залежності від цілей досліджень та прийнятних фізичних наближень.

Тема 2. Основні співвідношення квантової механіки, одноелектронні атоми. Метод Хартрі-Фока моделювання багатеелектронних атомів. Атомні орбіталі. Наближення Борна-Оппенгеймера для багатомолекулярних систем.

Тема 3. Квантово-розмірні ефекти. Відмінності в оптичних магнітних, теплових і електричних властивостях нанорозмірних структур в порівнянні з властивостями макрооб'єктів. Залежність цих властивостей від форми нанокластерів.

Тема 4. Поверхнева дифузія атомів і анізотропія густини поверхневої енергії нанокластеру як визначаючі фактори формування наночастинок з різною формою. Моделювання синтезу наночастинок.

Тема 5. Термічна стійкість нано-систем. Термодинаміка спонтанного розпаду нанодротів на впорядкований ланцюжок «нанокраплин», формування хвильоводів субхвильового діапазону.

Тема 6. Спонтанна модуляція поверхні при розвитку «шероховатого переходу» (roughening transition-RT). Методи керування морфологією поверхні нано-об'єктів при стимуляції RT «м'яким» (без розігріву) зовнішнім опроміненням

Тема 7. Механізми самовпорядкування при синтезі нанокластерів. Методи керування їх формою та проміжками між ними.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література

1. Наноструктури та нанотехнології. О. М. Назаров, М. М. Нищенко, НАУ, Київ 2012, 248 сс.
2. *Handbook of Nanophysics – Principles and Methods*. Edited by Klaus de Sattler, CRS Press.
3. *Handbook of Nanophysics - Nanoparticles and Quantum Dots*. Edited by Klaus de Sattler, CRS Press.
4. *Handbook of Nanophysics – Nanotubes and Nanowires*. Edited by Klaus de Sattler, CRS Press.
5. Д.М. Фреїк, Л.Т. Харун, А.М. Добровольська. Квантово-розмірні ефекти у конденсованих системах. Науково-історичні аспекти (Огляд). Фізика і хімія твердого тіла т. 12, № 1 (2011) С. 9-26
6. M. Kuno. Introduction to Nanoscience and Nanotechnology: A Workbook. 246 pp.
7. Поплавко Ю. М., Борисов О.В., Якименко Ю.І. Нанофізика, наноматеріали, наноелектроніка. Київ-НТУУ «КПІ», 2012 300 сс.

Додаткова література

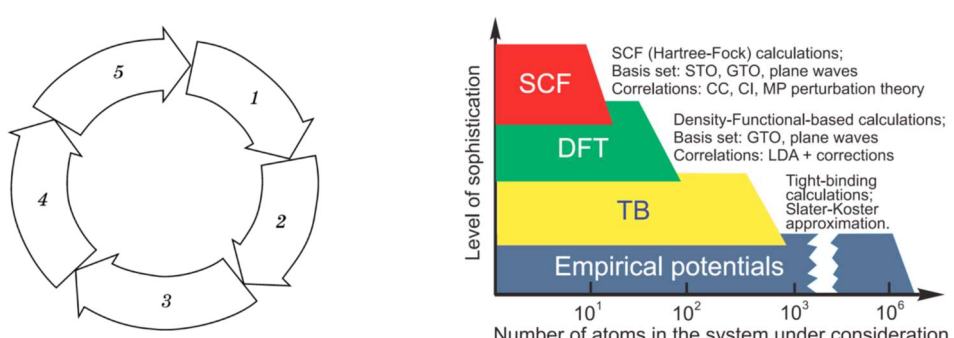
1. В. С. Осадчук, О. В. Осадчук. Основи наноелектроніки, ВНТУ, 2016
2. Новаковская Ю.В. Квантовая химия. МГУ – конспект лекцій.
3. С. В. Звонарев, В. С. Кортов, Т. В. Штанг. Моделирование структуры и свойств наносистем. 2014, 120 сс.
4. Ибрагимов И. М., Ковшов А. Н., Назаров Ю. Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем. 2010. — 384 сс.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекційна частина забезпечується інформаційно-рецептивним методом, надаючи базу для використання репродуктивного, евристичного методів та методу проблемного викладу на практичних заняттях.

Лекційні заняття

№	Назва теми лекції та перелік основних питань (перелік дидактичних засобів, посилання на літературу та завдання на СРС)
1	<p>Тема 1. Загальні принципи побудови математичної моделі фізичного процесу, характеристика моделей різних типів в залежності від цілей досліджень та прийятних фізичних наближень.</p>  <p>A) - Схема технологічного циклу чисельного експерименту. 1 – побудова</p>

	<p>математичної моделі, 2- вибір різницевої схеми, 3-програмування, 4 –розрахунки на ком'ютері, 5-порівняння результатів розрахунку з експериментом, 6 – уточнення моделі.</p> <p>В) – залежність максимальної кількості атомів в системі, яка піддається розрахунку за прийнятний час, від зроблених наближень різного типу.</p>
2	<p>Тема 2. Основні співвідношення квантової механіки, одноелектронні атоми. Метод Хартрі-Фока моделювання багатоелектронних атомів. Атомні орбіталі. Наближення Борна-Оппенгеймера для багатомолекулярних систем. Побудова Гамільтоніана багаточастинкової системи в різних наближеннях та опис ітераційної процедури пошуку розв'язку відповідних рівнянь Шредингера.</p>
3	<p>Тема 3. Квантово-розмірні ефекти. Відмінності в оптичних магнітних, теплових і електричних властивостях нанорозмірних структур в порівнянні з властивостями макро-об'єктів. Залежність цих властивостей від форми нанокластерів.</p> <p>Якщо розмір нанокластеру стає співрозмірним з довжиною хвилі де-Бройля електронів, то вступають у силу закони квантової механіки і відбуваються зміни в найбільш фундаментальній характеристиці електронної системи – енергетичному спектрі, який стає дискретним і чутливим до характерних розмірів нанокластера та його форми.</p>
4	<p>Тема 4. Поверхнева дифузія атомів і анізотропія густини поверхневої енергії нанокластеру як визначаючі фактори формування наночастинок з різною формою. Моделювання синтезу наночастинок.</p> <p>При достатньо високій температурі поверхневі атоми можуть стрибати в сусідні вакансії кристалічної ґратки. Результатом є трансформація поверхні нанокластеру до стану з мінімальною поверхневою енергією, густина якої різна на різних гранях даної кристалічної ґратки. Анізотропія густини поверхневої енергії і симетрія кристалічної ґратки визначають рівноважну форму нанокластеру.</p>
5	<p>Тема 5. Термічна стійкість нано-систем. Термодинаміка спонтанного розпаду нанодротів на впорядкований ланцюжок «нанокраплин», формування хвильоводів субхвильового діапазону.</p> <p>Мінімізація поверхневої енергії нанодроту могла б здійснитись при його трансформації в єдиний сфероподібний кластер. Але такий прямий перехід до глобального мінімуму забороняють закони динаміки його поверхні. В той же час, ці ж закони відкривають розпад нанодроту на впорядкований ланцюжок більш менших кластерів з досягненням локального мінімуму поверхневої енергії. Такий ефект може бути використаний, наприклад, при створенні хвильоводів самих різних форм.</p>
6	<p>Тема 6. Спонтанна модуляція поверхні при розвитку «шероховатого переходу» (roughening transition-RT). Методи керування морфологією поверхні нано-об'єктів при стимуляції RT «м'яким» (без розігріву) зовнішнім опроміненням.</p>

	<p><i>В залежності від матеріалу і орієнтації його зовнішньої грані відносно внутрішньої кристалічної структури може виникати ефект шереховатого переходу – при підвищенні температури вище порогового значення плоска поверхня кристалу стає періодично модульованою. Тобто, зростає загальна площа поверхні і, відповідно, поверхнева енергія. Але це не суперечить термодинаміці, тому що, строго кажучи, всякі «дозволені» переходи при фіксованій температурі повинні відповідати зменшенню вільної енергії Гельмгольца всієї системи. Збудження roughening transition можна здійснити на гранях, на котрих воно не виникає спонтанно при будь яких температурах, при стимуляції поверхневої дифузії м'яким опроміненням. Цей штучний ефект дає інструмент для керування динамікою морфології нано-об'єктів.</i></p>
7	<p><i>Тема 7. Механізми самовпорядкування при синтезі нанокластерів. Методи керування їх формою та проміжками між ними.</i></p> <p><i>Синтез нанокластерів є багатоступеневим процесом. Утворення первинних кластерів, потім боротьба за виживання окремих з них внаслідок перерозподілу потоків поверхневої дифузії. На заключній стадії виникає конкуренція між «вижившими» кластерами, яка базується на перерозподілі просторових дифузійних потоків вільних атомів і призводить до встановлення кінцевого порядку в системі.</i></p>

Практичні заняття

<i>№ з/п</i>	<i>Назва теми заняття та перелік основних питань</i>
1	<i>В наближенні «розірваних зв'язків» встановити розподіл густини поверхневої енергії (в умовних одиницях) на різних гранях кристалічної ґратки (простой кубічної, гране- та об'ємноцентрованої). Визначити рівноважні конфігурації наночастинок в відповідності до теореми Вульфа.</i>
2-3	<i>В наближенні взаємодії атомів тільки з найближчими сусідами розробити алгоритм динаміки границі великого кластера довільної форми на квадратній двовимірній ґратці. Написати відповідну програму. Співставити отриману в розрахунках рівноважну форму з передбаченням теореми Вульфа.</i>
4	<i>В наближенні ізотропної густини поверхневої енергії вивести дисперсійне рівняння для малих періодичних збуджень радіусу циліндричного нанодруту. Визначити порогову довжину хвилі збурень і довжину хвиль збурень з максимальним інкрементом наростання. (Аналіз нетрадиційного і оригінального підходу до вирішення цієї задачі на базі знань першого курсу фізмату).</i>
5	<i>Загальна дискусія для пошуку відповіді на наступні питання. 1) Як пояснити спонтанний розвиток шереховатого переходу, якщо при цьому збільшується поверхнева енергія. 2) Як якісно пояснити те, що такий перехід виникає тільки на вибраних гранях кристалічної ґратки. 3) Як можуть впливати на розвиток шереховатого переходу процеси обміну атомами поверхні нанокластера з навколишнім приповерхневим шаром вільних атомів. 4) Якісний аналіз впливу</i>

	<i>шереховатого переходу на розвиток термічної нестійкості нанодротів.</i>
6	<i>Модифікація програми, розробленої в ході практичних занять 2-3, для розрахунку синтезу двовимірних нанокластерів на двовимірному «нанодроті». Пошук критичної концентрації вільних атомів для початку утворення нанокластерів і встановлення форм цих нанокластерів в залежності від орієнтації вісі нанодроту.</i>

6. Самостійна робота студента/аспіранта

Самостійна робота здобувача наукового ступеня доктора філософії є основним засобом засвоєння навчального матеріалу у вільний від навчальних занять час і включає:

<i>№ з/п</i>	<i>Вид самостійної роботи</i>	<i>Кількість годин СРС</i>
<i>1</i>	<i>Підготовка до аудиторних занять</i>	<i>42</i>
<i>2</i>	<i>Підготовка до МКР</i>	<i>10</i>
<i>3</i>	<i>Підготовка до заліку</i>	<i>12</i>

Для виконання МКР та закріплення знань, здобутих під час аудиторних занять, аспірантам будуть дані пакети програм розрахунку динаміки поверхні 3-вимірних нанокластерів та нанодротів з різною симетрією кристалічної ґратки, розроблених лекторами та аспірантами КПІ. Загальні принципи побудови цих програм слухачі засвоять на практичних заняттях 2, 3, 6. На базі цих пакетів аспіранти наочно прослідкують цілу низку фізичних процесів, які відкривають несподівані для них самоузгоджені зв'язки між різними фізичними явищами.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Система вимог, які викладач ставить перед аспірантом:

- - правила відвідування занять: відповідно до Наказу 1-273 від 14.09.2020 р. заборонено оцінювати присутність або відсутність здобувача на аудиторному занятті, в тому числі нараховувати заохочувальні або штрафні бали. Відповідно до РСО даної дисципліни бали нараховують за відповідні види навчальної активності на лекційних та практичних заняттях.
- - правила поведінки на заняттях: студент має можливість отримувати бали за відповідні види навчальної активності на лекційних заняттях, передбачені РСО дисципліни. Використання засобів зв'язку для пошуку інформації на гугл-диску викладача, в інтернеті, в дистанційному курсі на платформі Сікорський здійснюється за умови вказівки викладача;
- - політика дедлайнів та перескладань: якщо аспірант не проходив або не з'явився на МКР (без поважної причини), його результат оцінюється у 0 балів. Перескладання результатів МКР не передбачено;
- - політика щодо академічної доброчесності: Кодекс честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут» <https://kpi.ua/files/honorcode.pdf> встановлює загальні моральні принципи, правила етичної поведінки осіб та передбачає політику академічної доброчесності для осіб, що працюють і навчаються в університеті, якими вони мають керуватись у своїй діяльності, в тому числі при вивченні та складанні контрольних заходів з дисципліни «Чисельні методи в квантовій механіці»;

- - при використанні цифрових засобів зв'язку з викладачем (мобільний зв'язок, електронна пошта, переписка на форумах та у соцмережах тощо) необхідно дотримуватись загальноприйнятих етичних норм, зокрема бути ввічливим та обмежувати спілкування робочим часом викладача.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Поточний контроль: опитування за темою заняття та за результатами самостійної роботи, МКР.

Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.

Семестровий контроль: залік.

Умови допуску до семестрового контролю: відсутні.

На першому занятті аспіранти ознайомлюються із рейтинговою системою оцінювання (PCO) дисципліни, яка побудована на основі «Положення про систему оцінювання результатів навчання», https://document.kpi.ua/files/2020_1-273.pdf

Рейтинг аспіранта з дисципліни складається з балів, які він отримує:

- 1) на практичних заняттях;
- 2) за модульну контрольну роботу (МКР);

Система рейтингових балів

1) Практичні заняття. Ваговий коефіцієнт дорівнює 10. Максимальна кількість балів, які може отримати аспірант на практичних заняттях становить $6 \times 10 = 60$ бали. Нарахування балів на одному практичному занятті:

- відмінні відповіді 10 балів;
- дуже добрі, добрі відповіді 8 бали;
- задовільні, достатні відповіді 6 бали.

2) Модульна контрольна робота (МКР). Ваговий коефіцієнт дорівнює 40. Максимальна кількість балів за контрольну роботу становить $1 \times 40 = 40$ балів. Нарахування балів за контрольну роботу:

- «відмінно», повна відповідь (не менше 90 % потрібної інформації) 36-40 балів;
- «добре», достатньо повна відповідь (не менше 75 % потрібної інформації або незначні неточності) 30-35 балів;
- «задовільно», неповна відповідь (не менше 60 % потрібної інформації та деякі помилки) 24-29 балів;
- «незадовільно», незадовільна відповідь (менше 60 % потрібної інформації) 0.

Якщо аспірант протягом семестру набрав не менше 60 балів, він отримує залік автоматом.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно

Якщо ж аспірант протягом семестру набрав менше 60 балів, він має скласти залікову контрольну роботу, ваговий коефіцієнт якої складає 100 балів. При цьому, стартовий рейтинг не

враховується. Кількість набраних на заліковій контрольній роботі балів переводиться в оцінку за тою ж шкалою. Якщо аспірант набрав протягом семестру 60 балів і більше, але хоче підвищити свою рейтингову оцінку, він може це зробити у співбесіді з викладачем.

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Перелік питань, які виносяться на семестровий контроль:

1. Стратегія вибору математичної моделі для дослідження тих чи інших властивостей нано-об'єкту.
2. Характеристика наближення Хартрі-Фока для встановлення оптичних, та магнітних властивостей нанокластерів.
3. Основи виникнення квантово-розмірних ефектів, їх приклади.
4. Густина поверхневої енергії поверхні кристалу, походження її анізотропії
5. Механізм поверхневої дифузії атомів, анізотропія коефіцієнту дифузії.
6. Рівноважні форми нанокластерів в відповідності до теореми Вульфа. Фізичні фактори, які відповідають за відхилення форми нанокластерів від передбачень теореми Вульфа.
7. Закони термодинаміки, які визначають еволюцію морфології наночастинок.
8. Загальні принципи побудови Монте-Карло моделі для розрахунку трансформації форми наночастинок.
9. Аналіз виконання принципу детальної рівноваги в станах нанокластерів з мінімізацією їх вільної енергії.
10. Кінетика розпаду нанодрота на нанокластери. Роль анізотропії густини поверхневої енергії в формуванні періоду цього розпаду.
11. Якісний аналіз фізичних механізмів, які є рушійними силами «шероховатого переходу». Причини його виникнення тільки на вибраних гранях кристалу.
12. Прояв шероховатого переходу в формуванні структури поверхні нанокластерів та в розпаді нанодрота на нанорозмірні фрагменти.
13. Ефекти «тіні» при синтезі нанокластерів при поверхневій дифузії абсорбованих атомів, та просторовій дифузії вільних атомів.
14. Фізичні фактори керованого синтезу наночастинок різних форм з того ж самого матеріалу.
15. Аналіз методів контролю механізмів самовпорядкування при синтезі дво-вимірних наноструктур.

Сертифікати проходження дистанційних чи онлайн курсів за відповідною тематикою можуть бути зараховані за умови виконання вимог, наведених у НАКАЗІ № 7-177 ВІД 01.10.2020 Р. «Про затвердження положення про визнання в КПІ ім. Ігоря Сікорського результатів навчання, набутих у неформальній/інформальній освіті».

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено професором кафедри загальної фізики та моделювання фізичних процесів доктором фіз.-мат. наук, професором Горшковим В'ячеславом Миколайовичем

Ухвалено кафедрою загальної фізики та моделювання фізичних процесів (протокол № 06-21 від 18.06.2021 р.)

Погоджено Методичною комісією факультету (протокол № 11 від 23.06.2021 р.)