

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВПО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ  
Заведующий кафедрой  
Физики твердого тела и наноструктур  
 (П.В. Середин)  
05.06.2023г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.09 Моделирование физических процессов нано- и микротехнологий

**1. Шифр и наименование направления подготовки:**

03.03.02 Физика

**2. Профиль подготовки:**

Физика медицинских, лазерных технологий и наноматериалов

**3. Квалификация (степень) выпускника:** бакалавр

**4. Форма обучения:** очная

**5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** Кафедра физики твердого тела и наноструктур

**6. Составители программы:** Дубровский О.И., кандидат физ.-мат наук, доцент

**7. Рекомендована:** НМС Физического факультета ВГУ

протокол № 5 от 25.05.2023 г.

**8. Учебный год:** 2027/2028

**Семестр:** 8

## 9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Целью освоения учебной дисциплины является подготовка студентов для решения научно-практических задач микро- и наноэлектроники с помощью компьютерного моделирования.

Задачами изучения дисциплины являются

- формирование у студентов знаний об основных положениях, принципах и методах вычислительной физики;
- получение студентами сведений и приобретение ими практических навыков, необходимых для разработки алгоритмов и программных средств применительно к задачам материаловедения;
- ознакомление студентов с физическими принципами, лежащими в основе моделирования свойств материалов;
- формирование у студентов знаний об основных моделях, применяемых для расчета кристаллической структуры, электронно-энергетического спектра и свойств материалов микро- и наноэлектроники;
- формирование умения применять современные методы и программные среды компьютерного моделирования для расчета, интерпретации и предсказания строения и физико-химических свойств микро- и наносистем.

**10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:** часть, формируемая участниками образовательных отношений, блок Б1.

**11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:**

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК-1	Способен модернизировать существующие и внедрять новые методы измерений параметров наноматериалов и наноструктур	ПК-1.3	Применяет знания о назначении, устройстве и принципах действия оборудования для измерения параметров наноматериалов и наноструктур	Знать: основы современных методов компьютерного моделирования физико-химических свойств материалов; Уметь: применять современные методы и программные среды компьютерного моделирования для расчета, интерпретации и предсказания физико-химических свойств материалов микро- и наноэлектроники; Владеть: навыками использования современных программных средств компьютерного моделирования для расчета, интерпретации и предсказания физико-химических свойств материалов микро- и наноэлектроники
ПК-2	Способен модернизировать существующие и внедрять новые процессы модификации наноматериалов и наноструктур	ПК-2.2	Применяет углубленные знания о структуре, физико-химических свойствах, конструкции и назначении наноматериалов и наноструктур	Знать: методы и правила в области обработки экспериментальных данных, оценки точности измерений и нормирования точности параметров прикладного математического обеспечения производственно-технической деятельности, направленной на моделирование процессов и объектов микро- и наноэлектроники; Уметь: разрабатывать и анализировать физические и математические

				<p>модели материалов микро- и нано-электроники;  Владеть: навыками разработки и анализа физических и математических моделей в области материаловедения в мккро- и наноэлектронике.</p>
--	--	--	--	--

## 12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 3/108.

Форма промежуточной аттестации: экзамен

## 13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость		
		Всего	По семестрам	
			8 семестр	№ семестра
Аудиторные занятия		48	48	
в том числе:	лекции	24	24	
	практические			
	лабораторные	24	24	
Самостоятельная работа		24	24	
в том числе: курсовая работа (проект)				
Форма промежуточной аттестации (экзамен – 36 час.)		36	36	
Итого:		108	108	

### 13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
<b>1. Лекции</b>			
1.1	Математическое моделирование и вычислительный эксперимент	Место вычислительного эксперимента в физике наносистем. Этапы вычислительного эксперимента и их краткая характеристика. Общие рекомендации для построения эффективных алгоритмов.	-
1.2	Элементы физики атомов.	Свойства одноэлектронных атомов. Атомные единицы длины и энергии. Строение многоэлектронных атомов. Принцип Паули. Правило Хунда. Двухатомные молекулы. Образование молекулы из двух атомов. Молекула водорода. Валентность атомов. Распределение электронной плотности в молекуле. Молекулы с ионной (гетерополярной) связью.	-
1.3	Многочастичные системы	Уравнение Шредингера для молекул, твердых тел и наносистем. Приближение Борна-Оппенгеймера, критерии применимости. Уравнения Хартри и Хартри-Фока. Обменный потенциал. Самосогласование	-
1.4	Теория функционала плотности	Уравнения Кона-Шэма. Аппроксимация локальной плотности. Численное решение уравнений функционала плотности. Приближение локальной плотности для обменно-корреляционного потенциала. Обобщенная градиентная аппроксимация.	-
1.5	Моделирование элек-	Электроны в периодическом потенциале. Вариаци-	-

	тронно-энергетического спектра кристаллов	онный метод Ритца. Построение кристаллических потенциалов. Обзор методов зонной теории. Метод присоединенных плоских волн и его практические аспекты. Линеаризация методов зонной теории. Метод псевдопотенциала.	
1.6	Моделирование электронного строения наноструктур	Метод линеаризованных присоединенных плоских волн для пленок. Построение пленочного потенциала. Методика вычисления спектральных характеристик. Электронная структура нанотрубок в приближении слабой связи. Метод линеаризованных присоединенных цилиндрических волн.	-
<b>2. Лабораторные занятия</b>			
2.1	Математическое моделирование и вычислительный эксперимент		-
2.2	Элементы физики атомов.	Лабораторная работа 1. Компьютерное моделирование энергетического спектра многоэлектронного атома.	-
2.3	Многочастичные системы		-
2.4	Теория функционала плотности		-
2.5	Моделирование электронно-энергетического спектра кристаллов	Лабораторная работа 2. Компьютерное моделирование кристаллического потенциала. Лабораторная работа 3. Расчет зонной структуры кристалла с помощью метода линеаризованных присоединенных плоских волн. Лабораторная работа 4. Расчет зонной структуры кристалла с помощью метода псевдопотенциала. Лабораторная работа 5. Компьютерное моделирование спектральных свойств кристалла.	-
2.6	Моделирование электронного строения наноструктур	Лабораторная работа 6. Компьютерное моделирование потенциала в нанопленке. Лабораторная работа 7. Расчет зонной структуры нанопленки с помощью пленочного метода линеаризованных присоединенных плоских волн. Лабораторная работа 8. Компьютерное моделирование спектральных свойств нанопленки. Лабораторная работа 9. Расчет зонной структуры нанотрубки в приближении слабой связи. Лабораторная работа 10. Компьютерное моделирование электронной структуры нанотрубки с помощью метода линеаризованных присоединенных цилиндрических волн.	-

### 13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				Всего
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	
1	Математическое моделирование и вычислительный эксперимент	2		-	4	6
2	Элементы физики атомов.	4		2	8	14
3	Многочастичные системы	6		-	12	18
4	Теория функционала	6		-	16	22

	плотности					
5	Моделирование электронно-энергетического спектра кристаллов	8		16	18	42
6	Моделирование электронного строения наноструктур	8		16	18	42
	Итого:	34		34	76	144

#### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Изучение дисциплины «Компьютерное моделирование материалов микро- и наноэлектроники» предусматривает осуществление учебной деятельности, состоящей из двух частей: обучения студентов преподавателем и самостоятельной учебной деятельности студентов по изучению дисциплины. Дисциплина «Компьютерное моделирование материалов микро- и наноэлектроники» реализуется с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий.

В учебном процессе используются следующие образовательные технологии. По образовательным формам: лекции; лабораторные занятия; индивидуальные занятия. По преобладающим методам и приемам обучения: объяснительно-иллюстративные (объяснение, показ–демонстрация учебного материала и др.); активные (анализ учебной и научной литературы, составление схем и др.) и интерактивные, в том числе и групповые (взаимное обучение в форме подготовки и обсуждения докладов); информационные; компьютерные; мультимедийные (работа с сайтами академических структур, научно-исследовательских организаций, электронных библиотек и др., разработка презентаций, сообщений и докладов, работа с электронными обучающими программами и т.п.).

Основной, наиболее экономичной формой получения и усвоения информации, теоретических знаний в вузе является лекция, позволяющая воспринять значительную сумму основных знаний и потому способствующая повышению продуктивности всех других форм учебного труда. Подготовка к лекциям является одним из видов самостоятельной работы студентов. Студентам, чтобы хорошо овладеть учебным материалом, необходимо выработать навыки правильной и планомерной работы. Перед началом лекционных занятий надо просмотреть все, что было сделано в предыдущий раз. Это позволит сосредоточить внимание и восстановить в памяти уже имеющиеся знания по данному предмету. Кроме того, такой метод поможет лучше запомнить, как старое, так и новое, углубит понимание того и другого, так как при этом устанавливаются связи нового со старым, что является не только обязательным, но и основным условием глубокого овладения материалом. Чем детальнее изучаемое ассоциируется с известным ранее, тем прочнее сохраняется в памяти.

Приступая к изучению нового материала, необходимо сосредоточиться, т.е. сконцентрировать внимание и не отвлекаться от выполняемой работы, помня, что желание запомнить является гарантией успешной работы, отсутствие же воли к запоминанию снижает эффект восприятия.

Записывать на лекции необходимо главное, не стремясь зафиксировать все слово в слово. Выбрать же главное без понимания предмета невозможно. Наличие собственного конспекта лекций позволяет еще раз ознакомиться, продумать, разобраться в новом материале, так как недостаточно хорошо понятые во время лекции положения могут быть восстановлены в памяти, сопоставлены с другими, додуманы, дополнены, уяснены и расширены с помощью учебной литературы. Записи являются пособиями для повторения, дают возможность охватить содержание лекции и всего курса в целом.

При этом хорошо овладеть содержанием лекции – это:

- знать тему;
- понимать значение и важность ее в данном курсе;
- четко представлять план;
- уметь выделить основное, главное;
- усвоить значение примеров и иллюстраций;
- связать вновь полученные сведения о предмете или явлении с уже имеющимися;
- представлять возможность и необходимость применения полученных сведений.

Существует несколько общих правил работы на лекции:

- к прослушиванию лекций следует готовиться, что позволит в процессе лекции отделить главное от второстепенного;
- лекции необходимо записывать с самого начала, так как оно часто бывает ключом ко всей теме;
- так как дословно записать лекцию невозможно, то необходимо в конспекте отражать: формулы, определения, схемы, трудные места, мысли, примеры, факты и положения от которых зависит понимание главного, новое и незнакомое, неопубликованные данные, материал отсутствующий в учебниках и т.п.;
- записывать надо сжато;
- во время лекции важно непрерывно сохранять рабочую установку, умственную активность.

Изучение теоретического материала в данном курсе не ограничивается подготовкой к лекциям и работой на данном виде занятий. Лекционная часть курса органически взаимосвязана с иными видами работ: участием в лабораторных занятиях, подготовкой и сдачей экзамена по дисциплине, в структуре которых также большое значение имеет самостоятельная работа студента.

Лабораторное занятие является эффективной формой организации учебного процесса в высшем учебном заведении, которая основывается на самостоятельной работе студентов. Лабораторные занятия не только закрепляют теоретические знания, но и позволяют студенту глубоко изучать механизм применения этих знаний, овладевать важным для специалиста умением интеллектуального проникновения в те процессы, которые исследуют на лабораторном занятии. Под влиянием этой формы занятий студентов часто возникают новые идеи научного и технического характера, которые используются в курсовых, квалификационных, дипломных работах. Лабораторные занятия в значительной степени обеспечивают отработку умений и навыков принятия практических решений в научной и производственной деятельности.

Приступая к работе в лаборатории, студенту следует знать, что любое несоблюдение расписания занятий и дисциплины будет считаться нарушением его служебных обязанностей. Преподаватель, который впервые встречается со студентами на вводном занятии, должен ознакомить их с общими правилами работы в лаборатории, которые они обязаны неукоснительно выполнять.

Успех проведения конкретного лабораторного занятия зависит от его подготовки, которая включает: глубокое изучение студентами теоретического материала; подготовку необходимой учебно-материальной базы и документации (инструкций, методических разработок и т.п.); подготовку преподавателя и студентов.

Подготовку к лабораторному занятию осуществляют в несколько этапов: предварительная подготовка, начало работы, ее выполнение, составление отчета и оценки работы преподавателем.

Предварительную подготовку к работе в лаборатории осуществляют в отведенное для самостоятельной работы время. Готовясь к ней, студент прежде всего дол-

жен осознать ее цель, усвоить теоретический материал, добиться четкого представления о физических процессах, которые исследуются на лабораторном занятии.

С целью качественного выполнения лабораторной работы преподаватели проверяют готовность студентов. Это происходит в форме беседы с каждым студентом, в процессе которой выявляют знания теоретического материала по теме работы, или в форме компьютерного тестирования по этим же вопросам. Таким образом выявляют уровень теоретической подготовки студентов, практические навыки, умение применять знания для решения практических задач.

После экспериментальной части работы студенты должны ответить на контрольные вопросы, преподаватель использует для оценки знаний и экспериментальных умений и навыков студента при зачете его работы.

Завершается лабораторная работа оформлением индивидуального отчета и его защитой перед преподавателем. Итоговые оценки выставляют в журнале учета выполнения лабораторных работ и учитывают при проведении зачёта по дисциплине.

Следовательно, проведение занятия предусматривает следующие этапы: предварительный контроль подготовленности студентов к выполнению конкретной лабораторной работы; выполнения конкретных задач в соответствии с предложенной тематикой; оформление индивидуального отчета; оценивания преподавателем результатов работы студентов.

Самостоятельная работа обучающихся наряду с аудиторной представляет одну из форм учебного процесса и является существенной ее частью, что наиболее ярко представлено в процессе подготовки бакалавров. Последнее обусловлено тем, что самостоятельная работа предназначена для формирования навыков самостоятельной работы как вообще, так и в учебной, научной деятельности, формирование и развитие способности принимать на себя ответственность, самостоятельно решать проблему, находить конструктивные решения, выход из кризисной ситуации и т.д.

Самостоятельная работа формирует самостоятельность не только как совокупность умений и навыков, но и как черту характера, играющую существенную роль в структуре личности современного специалиста высшей квалификации. Она воспитывает самостоятельность как черту характера. Никакие знания, полученные на уровне пассивного восприятия, не ставшие объектом собственной умственной или практической работы, не могут считаться подлинным достоянием человека.

Давая возможность расширять и обогащать знания, умения по индивидуальным направлениям, самостоятельная работа обучающегося позволяет создать разносторонних специалистов. В процессе самостоятельной работы развивают творческие возможности обучающегося, при этом самостоятельная работа завершает задачи всех видов учебной работы.

Самостоятельная работа - это планируемая работа обучающихся, выполняемая по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Преподаватель, ведущий занятия, организует, направляет самостоятельную работу обучающихся и оказывает им необходимую помощь. Однако самостоятельность обучающихся должна превышать объем работы, контролируемой преподавателем работы, и иметь в своей основе индивидуальную мотивацию обучающегося по получению знаний, необходимых и достаточных для будущей профессиональной деятельности в избранной сфере. Преподаватель при необходимости может оказывать содействие в выработке и коррекции данной мотивации, лежащей в основе построения самостоятельной деятельности обучающегося по изучению дисциплины, получению необходимых знаний и навыков.

Результат обучения и самостоятельной работы обучающегося предполагает наличие следующих составляющих:

- понимание методологических основ построения изучаемых знаний;
- выделение главных структур учебного курса;

- формирование средств выражения в данной области;
- построение методик решения задач и ориентации в проблемах (ситуациях).

Самостоятельная работа студента при изучении дисциплины «Компьютерное моделирование материалов микро- и наноэлектроники» включает в себя:

изучение теоретической части курса	– 26 часов
подготовку к лабораторным занятиям	– 30 часов
написание отчетов по лабораторным работам	– 20 часов
итога	– 76 часов

Подготовка к экзамену – 36 часов

## 15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия / Н.Ф. Степанов. – М: Мир, 2007. – 518с.
2.	Ибрагимов И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем. / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. – СПб.: Изд-во "Лань", 2010. – 384 с. – Режим доступа: <a href="https://e.lanbook.com/book/167744">https://e.lanbook.com/book/167744</a>
3.	Заводинский В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем / В.Г. Заводинский – М.: Физматлит, 2013. – 176 с. – Режим доступа: <a href="https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922113977.html">https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922113977.html</a>

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4.	Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х ч.) / Х. Гулд, Я. Тобочник. – М.: Мир, 1990. – 349 с. (1 ч.), 400 с. (2 ч.). – Режим доступа: <a href="http://padabum.com/d.php?id=14874">http://padabum.com/d.php?id=14874</a>
5.	Кунин С. Вычислительная физика / С. Кунин. – М.: Мир, 1992. – 518 с. – Режим доступа: <a href="https://ru.1lib.tw/book/2339650/e02609">https://ru.1lib.tw/book/2339650/e02609</a>
6.	Поттер Д. Вычислительные методы в физике / Д. Поттер. – М.: Мир, 1975. – 395 с. – Режим доступа: <a href="http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=457033">http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=457033</a> .
7.	Попов И.С. Вычислительные методы в задачах теоретической физики / И.С. Попов, М.А. Медведева. – Омск: ОмГУ, 2015. – 52 с. – Режим доступа: <a href="https://e.lanbook.com/book/75408">https://e.lanbook.com/book/75408</a>
8.	Ильина В.А. Численные методы для физиков-теоретиков. II / В.А. Ильина, П.К. Силаев. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2019. – 118 с. – Режим доступа: <a href="https://ru.1lib.tw/book/11744242/586f72">https://ru.1lib.tw/book/11744242/586f72</a>
9.	Немошкаленко В.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела: Зонная теория металлов / В.В. Немошкаленко, В.Н. Антонов. – Киев: Наукова думка, 1985. – 406 с. – Режим доступа: <a href="https://ru.1lib.tw/book/11633670/04cd06">https://ru.1lib.tw/book/11633670/04cd06</a>
10.	Дьячков П.Н. Электронные свойства и применение нанотрубок / П.Н. Дьячков. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 488 с. – Режим доступа: <a href="https://e.lanbook.com/book/135543">https://e.lanbook.com/book/135543</a>

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)\*:

№ п/п	Ресурс
1.	<a href="http://www.lib.vsu.ru">http://www.lib.vsu.ru</a> – Зональная научная библиотека ВГУ
2.	<a href="https://edu.vsu.ru">https://edu.vsu.ru</a> – Образовательный портал «Электронный университет ВГУ»
3.	<a href="https://biblioclub.ru">https://biblioclub.ru</a> – ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
4.	<a href="https://e.lanbook.com">https://e.lanbook.com</a> – ЭБС «Лань»
5.	<a href="https://lib.rucont.ru">https://lib.rucont.ru</a> – ЭБС Национальный цифровой ресурс «РУКОНТ»
6.	<a href="https://www.studentlibrary.ru">https://www.studentlibrary.ru</a> – ЭБС «Консультант студента»

## 16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1.	Курганский, С.И. Методы зонной теории. Часть 1. Методические указания по курсу «Вычислительные методы в теории твердого тела» / С.И. Курганский, Н.С. Переславцева,

	О.И. Дубровский. – Воронежский государственный университет. - Воронеж. - 2006. - 20 с. – Режим доступа: <a href="http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/sep06011.pdf">http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/sep06011.pdf</a>
2.	Компьютерная химия [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие для вузов / Воронеж. гос. ун-т; сост.: Е.В. Бутырская, Л.С. Нечаева. – Воронеж: Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета, 2011. - 27 с. - Режим доступа: <a href="http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m11-248.pdf">http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m11-248.pdf</a>

### 17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

При реализации дисциплины используются активные и интерактивные методы и технологии профессионального обучения.

### 18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Лабораторные работы выполняются в лаборатории компьютерных технологий, САПР и математического моделирования кафедры физики твердого тела и наноструктур: Компьютеры Pentium Intel Core i7 - 6 шт., компьютеры Pentium Intel Core Duo - 8 шт. с лицензионным программным обеспечением: Microsoft Windows 7, договор 3010-15/207-19 от 30.04.2019; программный пакет Wien2k, рег. № лицензии W2k-3039; программный пакет Quartus II version 9.1 Лицензия Build 304 01/25/2010 WebEdition; программные пакеты собственной разработки (свидетельства о гос. рег. программ для ЭВМ № 2011614890 от 22.06.2011; № 2011615201 от 01.07.2011), и свободно распространяемым программным обеспечением:

SciLab (GNU General Public License (GPL), бесплатное и/или свободное ПО, лицензия: <https://www.scilab.org/about/scilab-open-source-software>)

Lazarus (GNU General Public License (GPL), бесплатное и/или свободное ПО, лицензия: <https://www.lazarus-ide.org/index.php>);

Quantum Espresso (GNU General Public License (GPL), бесплатное и/или свободное ПО, лицензия: [https://www.quantum-espresso.org/Doc/user\\_guide/node6.html](https://www.quantum-espresso.org/Doc/user_guide/node6.html))

XCrysDen (GNU General Public License (GPL), бесплатное и/или свободное ПО, лицензия: <http://www.xcrysden.org/License.html>)

LibreOffice (GNU Lesser General Public License (LGPL), бесплатное и/или свободное ПО, лицензия: <https://ru.libreoffice.org/about-us/license/>);

Реализация дисциплины с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий осуществляется через образовательный портал "Электронный университет ВГУ".

### 19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Математическое моделирование и вычислительный эксперимент	ПК-7	ПК-7.1	Устный опрос
2.	Элементы физики атомов.	ПК-3	ПК-3.1	Устный опрос Лаб. работа 1
3.	Многочастичные системы	ПК-7	ПК-7.1	Устный опрос
4.	Теория функционала плотности	ПК-7	ПКВ-7.1	Устный опрос

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
5.	Моделирование электронно-энергетического спектра кристаллов	ПК-3 ПК-7	ПК-3.1 ПК-7.1	Лаб. работы 2 – 5
6.	Моделирование электронного строения наноструктур	ПК-3 ПК-7	ПК-3.1 ПК-7.1	Лаб. работы 6 - 10
Промежуточная аттестация форма контроля - экзамен				Комплект КИМ

## 20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

### 20.1 Текущий контроль успеваемости

Текущий контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: отчеты о выполнении лабораторных работ.

#### Перечень тем лабораторных работ

Лабораторная работа 1. Компьютерное моделирование энергетического спектра много-электронного атома.

Лабораторная работа 2. Компьютерное моделирование кристаллического потенциала.

Лабораторная работа 3. Расчет зонной структуры кристалла с помощью метода линеаризованных присоединенных плоских волн.

Лабораторная работа 4. Расчет зонной структуры кристалла с помощью метода псевдо-потенциала.

Лабораторная работа 5. Компьютерное моделирование спектральных свойств кристалла.

Лабораторная работа 6. Компьютерное моделирование потенциала в наноплёнке.

Лабораторная работа 7. Расчет зонной структуры наноплёнки с помощью плёночного метода линеаризованных присоединенных плоских волн.

Лабораторная работа 8. Компьютерное моделирование спектральных свойств наноплёнки.

Лабораторная работа 9. Расчет зонной структуры нанотрубки в приближении слабой связи.

Лабораторная работа 10. Компьютерное моделирование электронной структуры нанотрубки с помощью метода линеаризованных присоединенных цилиндрических волн.

Для текущего контроля успеваемости используется устный опрос, отчеты о ходе выполнения лабораторных работ, на основе которых выставляется предварительная оценка *отлично/хорошо/удовлетворительно/неудовлетворительно*.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала предварительных оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, применять теоретические знания при выполнении лабораторных работ	Повышенный уровень	<i>Отлично</i>
Обучающийся владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), допускает незначительные ошибки при выполнении лабораторных задач	Базовый уровень	<i>Хорошо</i>
Обучающийся владеет частично теоретическими основами дисциплины, фрагментарно способен выполнять лабораторные задания	Пороговый уровень	<i>Удовлетворительно</i>

Неудовлетворительное выполнение тестовых заданий. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки при выполнении лабораторных работ	–	Неудовлетворительно
---	---	---------------------

## 20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

### Комплект КИМ

#### Контрольно-измерительный материал № 1

1. Свойства одноэлектронных атомов. Атомные единицы длины и энергии.
2. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн для пленок.

#### Контрольно-измерительный материал № 2

1. Строение многоэлектронных атомов. Принцип Паули. Правило Хунда.
2. Компьютерное моделирование электронной структуры нанопленок.

#### Контрольно-измерительный материал № 3

1. Двухатомные молекулы. Образование молекулы из двух атомов. Молекула водорода.
2. Метод линеаризованных присоединенных цилиндрических волн.

#### Контрольно-измерительный материал № 4

1. Валентность атомов. Распределение электронной плотности в молекуле. Молекулы с ионной (гетерополярной) связью.
2. Электронная структура нанотрубок в приближении слабой связи.

#### Контрольно-измерительный материал № 5

1. Приближение Хартри и Хартри-Фока.
2. Методика вычисления спектральных характеристик.

#### Контрольно-измерительный материал № 6

1. Уравнения Кона-Шэма. Аппроксимация локальной плотности.
2. Компьютерное моделирование электронной структуры нанотрубок.

#### Контрольно-измерительный материал № 7

1. Приближенные формы уравнения Шредингера для молекул, твердых тел и наносистем.
2. Численное решение уравнений функционала плотности.

#### Контрольно-измерительный материал № 8

1. Общие рекомендации для построения эффективных алгоритмов.
2. Электроны в периодическом потенциале.

#### Контрольно-измерительный материал № 9

1. Адиабатическая теория и приближение Борна-Оппенгеймера, критерии применимости.
2. Вариационный метод Ритца.

#### Контрольно-измерительный материал № 10

1. Построение кристаллических потенциалов.
2. Линеаризация методов зонной теории.

## Контрольно-измерительный материал № 11

1. Этапы вычислительного эксперимента и их краткая характеристика.
2. Метод псевдопотенциала.

### Описание технологии проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине – экзамен. В приложение к диплому вносится оценка *отлично/хорошо/удовлетворительно*.

Оценка уровня освоения дисциплины «Компьютерное моделирование материалов микро- и нанoeлектроники» осуществляется по следующим показателям:

- качество и своевременность выполнения лабораторных работ;
- полнота ответов на вопросы контрольно-измерительного материала;
- полнота ответов на дополнительные вопросы.

Критерии оценки освоения дисциплины «Компьютерное моделирование материалов микро- и нанoeлектроники»:

– оценка *отлично* выставляется при полном соответствии работы студента всем вышеуказанным показателям. Соответствует высокому (углубленному) уровню сформированности компетенций: компетенции сформированы полностью, проявляются и используются систематически, в полном объеме. Данный уровень превосходит, по крайней мере, по одному из перечисленных выше показателей повышенный (продвинутый) уровень;

– оценка *хорошо* выставляется в случае, если работа студента при освоении дисциплины не соответствует одному из перечисленных показателей или в случае предоставления курсовых работ и отчетов по лабораторным работам позже установленного срока. Соответствует повышенному (продвинутому) уровню сформированности компетенций: компетенции в целом сформированы, но проявляются и используются фрагментарно, не в полном объеме. Данный уровень превосходит, по крайней мере, по одному из перечисленных выше показателей пороговый (базовый) уровень;

– оценка *удовлетворительно* выставляется в случае, если работа студента при освоении дисциплины не соответствует любым двум из перечисленных показателей. Соответствует пороговому (базовому) уровню сформированности компетенций: компетенции сформированы в общих чертах, проявляются и используются ситуативно, частично. Данный уровень обязателен для всех осваивающих основную образовательную программу;

– оценка *неудовлетворительно* выставляется в случае несоответствия работы студента всем показателям, его неорганизованности, безответственности и низкого качества работы при выполнении лабораторных работ, предусмотренных программой дисциплины.

Факт невыполнения требований, предъявляемых к студенту при освоении дисциплины «Компьютерное моделирование материалов микро- и нанoeлектроники» и отраженных в вышеперечисленных критериях, фиксируется в ведомости оценкой *неудовлетворительно*.

Если студент не осваивает дисциплину в установленном программой объеме и в сроки, определенные графиком учебного процесса, он не допускается к промежуточной аттестации по данному виду учебной работы.

### 20.3 Фонд оценочных средств сформированности компетенций студентов, рекомендуемый для проведения диагностических работ:

ПК-3: Способен выполнять работы по технологической подготовке производства материалов и изделий электронной техники

Индикатор: ПК-3.1

ПК-7: Способен проводить технологические процессы производства материалов и изделий электронной техники

Индикатор: ПК-7.1

### Перечень заданий для проверки сформированности компетенции:

1) Закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

1. Какая арифметическая операция может привести к катастрофической потере точности?

- а) сложение двух близких чисел одного знака  
**б) вычитание двух близких чисел одного знака**  
в) умножение двух близких чисел одного знака  
г) деление двух близких чисел одного знака

2. Каков квантово-механический смысл первого боровского радиуса?

- а) наиболее вероятное расстояние электрона до ядра в основном состоянии атома водорода**  
б) среднее расстояние электрона до ядра в основном состоянии атома водорода  
в) радиус окружности, по которой электрон вращается вокруг ядра  
г) наибольшее расстояние электрона до ядра в основном состоянии атома водорода

3. Какие переходы запрещены дипольными правилами отбора? (Укажите все ответы)

- а)  $4f \rightarrow 3d$       б)  $2p \rightarrow 3d$       **в)  $4d \rightarrow 3s$**       г)  $4s \rightarrow 2p$

4. Какие из обозначений **не** соответствуют возможным состояниям электрона в атоме? (Укажите все ответы)

- а)  $2p_{1/2}$       **б)  $4d_{1/2}$**       в)  $3s_{1/2}$       **г)  $5f_{3/2}$**

5. Какие состояния не испытывают спин-орбитального расщепления энергетических уровней?

- а)  $2p$       б)  $3d$       **в)  $4s$**   
г) Все эти состояния расщепляются вследствие спин-орбитального взаимодействия

6. Сколько электронов может находиться в  $4d$ - состоянии?

- а) от 0 до 10**      б) от 0 до 5      в) от 1 до 6      г) от 1 до 14

7. В соответствии с принципом Паули волновая функция системы электронов должна быть:

- а) симметричной      **б) антисимметричной**      в). вещественной      г) осциллирующей

8. Сколько типов двумерных решеток Браве вам известно?

- а) 5**      б) 7      в) 12      г) 14

9. Какие из однослойных углеродных нанотрубок относятся к структурному типу «armchair»? (Укажите все ответы)

- а) (9,3)      б) (9,0)      **в) (9,9)**      **г) (6,6)**

10. Какие из однослойных углеродных нанотрубок относятся к структурному типу «zigzag»? (Укажите все ответы)

- а) (9,3)      **б) (9,0)**      в) (9,9)      г) (6,6)

2) Открытые задания (тестовые, повышенный уровень сложности):

1. Электрон в атоме находится в  $d$ -состоянии. Чему равно максимальное значение проекции орбитального момента импульса на направление внешнего магнитного поля?

Ответ:  $2\hbar$

2. Чему равен модуль орбитального магнитного момента электрона в основном состоянии атома водорода?

Ответ:  $0$

3. Чему равен модуль собственного момента импульса электрона?

Ответ:  $\hbar \frac{\sqrt{3}}{2}$

4. Какова электронная конфигурация атома хлора? (Атом хлора имеет 17 электронов)

Ответ:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

5. Какие функции используются в качестве базисных в методе плоских волн?

Ответ:  $\frac{1}{\sqrt{\Omega_{WS}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

### 3) Открытые задания (повышенный уровень сложности):

1. Перечислите причины, которыми обусловлено наличие погрешности в решении, получаемом с помощью вычислительного эксперимента?

.....*Ответ:*

*Наличие погрешности решения обусловлено рядом причин:*

- ◆ *Математическая модель является приближенным описанием реального процесса, поэтому характеристики процесса, вычисленные в рамках принятой модели, отличаются от истинных характеристик.*
- ◆ *Исходные данные содержат погрешности, поскольку они получаются либо в результате измерений, либо являются результатом решения некоторых вспомогательных задач.*
- ◆ *Применяемые для решения задачи методы в большинстве случаев являются приближёнными.*
- ◆ *При вводе исходных данных, выполнении арифметических операций и при выводе результатов производятся округления.*

2. Записать уравнение Шрёдингера для системы, состоящей из  $n$  электронов и  $N$  атомных ядер. Описать идею приближения Борна-Оппенгеймера.

.....*Ответ:*

*Рассмотрим систему, состоящую из  $n$  электронов и  $N$  атомных ядер. Обозначим координаты, массы и заряды ядер  $\vec{R}_i$ ,  $M_i$  и  $Z_i$ , соответственно, координаты электронов  $\vec{r}_i$ , а операторы Лапласа, дифференцирующие по координатам  $i$ -го электрона и  $i$ -го ядра -  $\Delta_i$  и  $\Delta Z_i$ , соответственно.*

*Оператор Гамильтона  $\hat{H}$  учитывает все взаимодействия в рассматриваемой системе. Он складывается из следующих частей:*

$$\hat{T}_e = -\sum_{i=1}^n \frac{1}{2} \Delta_i \quad \text{— оператор кинетической энергии электронов;}$$

$$\hat{T}_Z = -\sum_{i=1}^N \frac{m_e}{2M_i} \Delta Z_i \quad \text{— оператор кинетической энергии ядер;}$$

$$U_{eZ} = -\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^N \frac{Z_j}{|\vec{R}_j - \vec{r}_i|} \quad \text{— потенциальная энергия взаимодействия электронов и ядер.}$$

$$U_e = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \quad \text{— потенциальная энергия взаимодействия электронов друг с дру-}$$

*гом;*

$$U_Z = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{Z_i Z_j}{|\vec{R}_j - \vec{R}_i|} - \text{потенциальная энергия взаимодействия ядер между собой};$$

Таким образом, полный гамильтониан системы имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_Z + U_{eZ} + U_e + U_Z.$$

Решая уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N)$$

с гамильтонианом  $\hat{H}$  можно было бы найти энергии электронов и ядер, волновые функции и т.д., т.е. получить полную информацию о системе. Однако в твердом теле, например, концентрация ядер  $\approx 10^{23} \text{ см}^{-3}$  ядер и в  $Z$  раз больше электронов, так решить столь сложное уравнение не представляется возможным. Чтобы пойти дальше, необходимо воспользоваться какой-либо упрощающей физической идеей. По сравнению с электронами, ядра совершают малые перемещения, колеблясь около положений равновесия. Кроме того, характерные скорости электронов много больше скоростей ядер. Все это является обоснованием для приближения Борна – Оппенгеймера (адиабатического приближения): в первом приближении можно считать, что электроны в кристалле движутся в поле неподвижных ядер, что существенно упрощает задачу.

3. Записать уравнение Шрёдингера для системы, состоящей из  $n$  электронов, находящихся в поле неподвижных ядер. Описать идею метода самосогласованного поля.

.....*Ответ:*

Рассмотрим систему  $N$  взаимодействующих друг с другом электронов в поле неподвижных ядер. Уравнение Шрёдингера для стационарных состояний этой системы имеет вид:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$$

с гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{r_{ij}},$$

где

$$\hat{H}_i = -\frac{1}{2} \Delta_i + V(\vec{r}_i).$$

Здесь  $\Delta_i \equiv \nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$ ;  $V(\vec{r}_i)$  - потенциальная энергия  $i$ -го электрона в поле ядер;  $r_{ij} = |\vec{r}_j - \vec{r}_i|$ .

Волновые функции для такой системы могут быть получены лишь с помощью тех или иных приближённых методов. Одним из наиболее эффективных методов решения подобных задач является метод самосогласованного поля, предложенный в 1927 году Д. Хартри. Идея метода самосогласованного поля состоит в замене в гамильтониане  $\hat{H}$  потенциальной энергии взаимодействия электронов некоторым эффективным внешним полем  $U_{\text{эфф}}(\vec{r})$ , в котором каждый электрон движется независимо. Поле  $U_{\text{эфф}}(\vec{r})$  должно наилучшим образом описывать усреднённое действие всех остальных электронов на данный. Гамильтониан системы равен теперь сумме гамильтонианов, каждый из которых зависит только от координат одного электрона, т.е.

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i',$$

где

$$\hat{H}_i' = -\frac{1}{2} \Delta_i + V(\vec{r}_i) + U_{\text{эфф}}(\vec{r}_i).$$

4. Записать антисимметричную волновую функцию для системы из  $n$  электронов. Доказать, что она удовлетворяет принципу Паули.

.....*Ответ:*

*Антисимметричная волновая функция системы из  $N$  электронов имеет вид:*

$$\Phi(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\tau_1) & \varphi_1(\tau_2) & \dots & \varphi_1(\tau_N) \\ \varphi_2(\tau_1) & \varphi_2(\tau_2) & \dots & \varphi_2(\tau_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_N(\tau_1) & \varphi_N(\tau_2) & \dots & \varphi_N(\tau_N) \end{vmatrix}.$$

*Если обменяют в этом выражении координаты пары электронов, например,  $\tau_1 \leftrightarrow \tau_2$ , то это эквивалентно перестановке двух столбцов определителя, а при этом он изменяет свой знак, т.е.*

$$\Phi(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N) = -\Phi(\tau_2, \tau_1, \dots, \tau_N).$$

*Если же считать два квантовых состояния совпадающими, например,  $\varphi_1 = \varphi_2$ , то две строки определителя равны, а в этом случае  $\Phi = 0$ . Множитель  $\frac{1}{\sqrt{N!}}$  обеспечивает нормировку функции  $\Phi(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$ .*

5. Описать идею теории функционала плотности. На каких теоремах базируется эта теория?

.....*Ответ:*

*Основная цель теории функционала плотности состоит в том, чтобы при описании электронной подсистемы заменить многоэлектронную волновую функцию плотностью заряда электронной подсистемы исследуемого объекта – электронной плотностью  $\rho(\mathbf{r})$ . Это ведет к существенному упрощению задачи, поскольку многоэлектронная волновая функция зависит от  $3N$  переменных – по три пространственных координаты на каждый из электронов, в то время как электронная плотность  $\rho(\mathbf{r}) = \rho(x, y, z)$  – это функция лишь трех пространственных координат.*

*Теория функционала плотности базируется на двух теоремах Хоэнберга - Кона.*

*Первая теорема Хоэнберга – Кона утверждает о существовании однозначной связи между свойствами электронной системы в основном состоянии и электронной плотностью системы в этом состоянии. Данная теорема является исключительно теоремой существования, поэтому не дает никакой информации о том, каким именно должен быть функционал, позволяющий рассчитывать энергию электронной подсистемы. Вместе с тем, она утверждает, что возможно построение модельных функционалов, позволяющих получать приблизительные результаты.*

*Вторая теорема представляет собой сформулированный для функционала плотности вариационный принцип квантовой механики: утверждается, что энергия электронной подсистемы, записанная как функционал электронной плотности, имеет минимум, равный энергии основного состояния.*

*Таким образом, согласно теории функционала плотности, существует взаимно однозначное соответствие между волновой функцией многоэлектронной системы и*

электронной плотностью основного состояния  $\rho(\mathbf{r})$ . Значит,  $\rho(\mathbf{r})$  неявно определяет все свойства системы, которые можно получить, решая уравнение Шрёдингера. Таким образом, согласно теории функционала плотности, существует взаимно однозначное соответствие между волновой функцией многоэлектронной системы и электронной плотностью основного состояния  $\rho(\mathbf{r})$ . Значит,  $\rho(\mathbf{r})$  неявно определяет все свойства системы, которые можно получить, решая уравнение Шрёдингера.

6. Сформулировать теорему Блоха для электронов в кристалле.

.....*Ответ:*

Важнейшим следствием трансляционной периодичности кристалла является теорема Блоха:

Собственные состояния  $\psi$  оператора Гамильтона

$$\mathbf{H} = -\nabla^2 + V(\mathbf{r}),$$

где потенциал  $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = V(\mathbf{r})$  при всех  $\mathbf{R}_n$  из решетки Браве, могут быть выбраны таким образом, чтобы с каждым из них был связан некоторый волновой вектор  $\mathbf{k}$  и для любого  $\mathbf{R}_n$  из решетки Браве выполнялось равенство

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

7. Доказать, что для любого волнового вектора всегда найдётся ему эквивалентный вектор, лежащий в пределах первой зоны Бриллюэна.

.....*Ответ:*

Если вектор  $\mathbf{k}'$  не лежит в первой зоне Бриллюэна, то его можно представить в виде:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K}_m,$$

где  $\mathbf{K}_m$  – вектор обратной решетки, а  $\mathbf{k}$  теперь лежит в первой зоне Бриллюэна. Поэтому если соотношение

$$\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}_n} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}),$$

справедливо для вектора  $\mathbf{k}'$ , то оно справедливо и для вектора  $\mathbf{k}$ :

$$\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{K}_m\mathbf{R}_n} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}),$$

и можно считать, что  $\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$  относится к волновому вектору  $\mathbf{k}$ , так как индекс  $\mathbf{k}$  у волновой функции означает только то, что при трансляции на вектор  $\mathbf{R}_n$  волновая функция умножается на  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}$ , так что вектор  $\mathbf{k}'$  в последнем равенстве можно заменить на  $\mathbf{k}$ . Таким образом векторы  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ , различающиеся на  $\mathbf{K}_m$ , называют эквивалентными.

8. Опишите идею вариационного метода Ритца для решения одноэлектронного уравнения Шрёдингера в кристалле.

.....*Ответ:*

Одноэлектронное уравнение Шрёдингера в кристалле имеет вид:

$$\hat{H} \psi_{j\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[ -\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_{j\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_j(\mathbf{k}) \psi_{j\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

где  $\psi_{j\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  и  $E_j(\mathbf{k})$  – соответственно волновые функции и собственные значения энергии в кристалле ( $j$  нумерует энергетические зоны,  $\mathbf{k}$  – волновой вектор),  $V(\mathbf{r})$  – эффективный кристаллический потенциал. Для кристаллов  $V(\mathbf{r})$  – периодическая функция:

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = V(\mathbf{r})$$

для всех векторов  $\mathbf{R}_n$ , принадлежащих решетке Браве.

Из квантовой механики известно, что решение данного уравнения эквивалентно отысканию экстремальных значений функционала:

$$E[\psi] = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d\mathbf{r}}{\int \psi^* \psi d\mathbf{r}}$$

на классе функций, удовлетворяющих теореме Блоха. Данную задачу решают, как правило, методом Рунца.

Метод Рунца заключается в следующем. Берется некоторая система так называемых координатных или базисных функций  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ , удовлетворяющих граничным условиям и по возможности наилучшим образом соответствующих существу задачи. Собственная волновая функция ищется в виде линейной комбинации этих базисных функций:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mu=1}^m C_{\mu} \varphi_{\mu}(\mathbf{r}),$$

в которой вариационные параметры  $C_{\mu}$  определяются из условия минимума функционала энергии.

9. Составить входной файл для расчета электронной плотности и кулоновского потенциала нанопленки с помощью программного комплекса FilmAll.

.....*Ответ:*

*Входной файл для девятислойной пленки лития имеет вид:*

1				индекс, определяющий количество информации, выводимой в выходной текстовый файл
Li_9				название пленки
4				номер двумерной решетки Браве
1 1 1 0 0				номера первых записей в выходные файлы прямого доступа
1 1				число сортов атомов
Li				символ атома (для каждого сорта)
5				число неэквивалентных атомов (для каждого сорта)
1.0 0.0				обменные параметры
3.491				параметры $a$ и $b$ решетки (в Å)
3.491				период идентичности в направлении $z$ (в Å)
1.5116 1.5116 1.5116				радиусы "muffin-tin" сфер (для каждого
1.5116 1.5116				неэквивалентного атома)
0.0 0.0 0.0				координаты атомов в единицах параметров решетки A,B,C
0.5 0.5 0.5				(для каждого неэквивалентного атома каждого сорта атомов
0.5 0.5 0.5				
0.0 0.0 1.0				
0.5 0.5 1.5				
0.0 0.0 2.0				
1				номер первой записи во входном файле прямого доступа
3.0 1.5				атомный номер; количество электронов со спином вверх
504				число точек сетки в вакуумной области
25.0				длина вакуумной области (в а.е.)
8.4936				половина толщины пленки (в Å)

10. Составить входной файл для расчета электронной зонной структуры нанопленки с помощью программного комплекса FilmAll.

....*Ответ:*

*Входной файл для девятислойной пленки лития имеет вид:*

```
8.4936
10.0
70.0
0.4
1
1
1
1
1 0 1 0 1
45
450
-0.2      1.5
8
4
-0.708068273967
F
GAMM 0.0      0.0
Xx 0.5      0.0
M 0.5      0.5
Dlx1 0.25     0.0
Sig1 0.25     0.25
Yy1 0.5      0.25
Dlx2 0.125    0.0
Dlx3 0.375    0.0
Sig2 0.125    0.125
P1 0.25      0.125
P2 0.375     0.125
Yy2 0.5      0.125
P3 0.375     0.25
SIG3 0.375    0.375
Yy3 0.5      0.375
```

### **Критерии и шкалы оценивания заданий ФОС:**

Для оценивания выполнения заданий используется балльная шкала:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

- 1 балл – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ (полностью или частично неверный)

2) открытые задания (тестовые, повышенный уровень сложности).

- 2 балла – указан верный ответ,
- 0 баллов – указан неверный ответ (полностью или частично неверный)

3) открытые задания (повышенный уровень сложности):

- 5 баллов – задание выполнено верно (получен правильный ответ, обоснован (аргументирован) ход выполнения (при необходимости));
- 2 балла – выполнение задания содержит незначительные ошибки, но приведен правильный ход рассуждений, или получен верный ответ, но отсутствует обоснование хода его выполнения (если оно было необходимым), или задание выполнено неполностью, но получены промежуточные (частичные) результаты, отражающие правильность хода выполнения задания, или в случае, если задание состоит из нескольких подзаданий, верно выполнено 50% таких подзаданий;
- 0 баллов – задание не выполнено или выполнено неверно (получен неправильный ответ, ход выполнения ошибочен или содержит грубые ошибки).

Задания раздела 20.3 рекомендуются к использованию при проведении диагностических работ с целью оценки остаточных результатов освоения данной дисциплины (знаний, умений, навыков).