Федеральное государственное бюджетное образовательное

учреждение высшего образования

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Факультет вычислительной математики и кибернетики

**УТВЕРЖДАЮ**

декан факультета вычислительной математики и кибернетики

**\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_/И.А. Соколов /**

**«\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_20\_\_\_г.**

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Наименование дисциплины:**

**Вычислительная физика и нанотехнологии**

**Уровень высшего образования:**

**бакалавриат**

**Направление подготовки / специальность:**

**01.03.02 «Прикладная математика и информатика» (3++)**

**Направленность (профиль):**

**Математические и компьютерные методы решения задач естествознания**

**Форма обучения:**

**очная**

**Москва 2023**

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 01.03.02, 01.04.02 "Прикладная математика и информатика" программы бакалавриата Утвержден приказом МГУ от 30 августа 2019 года № 1041 (в редакции приказов МГУ от 11 сентября 2019 года № 1109, от 10 июня 2021 года № 609, от 7 октября 2021 года № 1048, от 21 декабря 2021 года № 1404, от 2 ноября 2022 года № 1299)

**1.Область применения и нормативные ссылки**

Курс посвящен изучению вычислительных моделей и алгоритмов для описания физических процессов используемых при создании новых молекулярных систем на основе нанотехнологий. Рассматриваются модели квантового уровня, молекулярной динамики и сплошной среды и их взаимное влияние. Основное внимание уделяется вычислительным аспектам и тем приближениям, которые используются в современных вычислительных кодах, позволяющих решать задачи нанотехнологий на современных параллельных супер-ЭВМ. Рассматриваются примеры применения вычислительных кодов и пакетов программ при разработке новых технологических процессов.

Рецензенты: академик Д.П.Костомаров, профессор Ю.Н.Днестровский.

Рабочая программа дисциплины “Вычислительная физика и нанотехнологии”, составитель профессор А.М.Попов.

Рабочая программа предназначена для преподавания дисциплины «Вычислительная физика и нанотехнологии»базовой части ЕН цикла студентам очной формы обучения по направлениям подготовки «01.03.02 Прикладная математика и информатика» в 8 семестре.

Рабочая программа составлена с учетом Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования по направлению подготовки, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от "8" декабря 2009 г. № 712, а также образовательного стандарта МГУ интегрированный магистр по направлению «010400.62 Прикладная математика и информатика».

**2.** **Цели освоения дисциплины**

Основное внимание уделяется освоению вычислительных аспектов и тем приближениям, которые используются в современных вычислительных кодах в мире, позволяющих решать задачи нанотехнологий на современных параллельных супер-ЭВМ.

Целью освоения дисциплины является развитие междисциплинарного мышления, как новой культурной формы деятельности - стирания привычных границ между математикой, физикой, химией, биологией с целью создания нового качества молекулярных нано-систем.

В частности, ставятся следующие задачи:

1) определить роль и место математики, вычислительной математики, квантовой физики, квантовой химии, биологии в создании новых технологий и моделирования сложных систем.

2) выяснить характер и особенности создания гетерогенных молекулярных систем с новыми свойствами.

3) проанализировать, каков исторический путь от создания традиционных объемных материалов и молекулярных систем к разработке новых гетерогенных молекулярных систем, обладающих необходимыми свойствами.

4) установить связи между различными науками – математикой, физикой, химией, биологией, необхлдимых для создания новых технологий.

5) овладеть навыками работы с литературой, особенностями библиографического поиска, связанного с междисциплинарми особенностями.

**3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины**

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций по направлению подготовки «01.03.022 – Прикладная математика и информатика»:

а) общекультурных (ОК):

cпособность критически переосмысливать накопленный опыт в создании молекулярных систем с заданными свойствами, изменять при необходимости вид и характер своей профессиональной деятельности, уметь связывать математические методы и модели с областями квантовой физики, химии, биологии (ОК-8);

способность использовать основные законы естественнонаучных дисциплин таких как квантовая физика, химия биология в области математического моделирования, применять методы математического моделирования, теоретического и экспериментального исследования в области создания новых технологий создания молекулярных систем (ОК-10);

cпособность владеть основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, иметь навыки работы с суперкомпьютерами как средством управления информацией (ОК-12);

способность работать с информацией в глобальных компьютерных сетях, способность использования новых созданных компьютерных кодов в различных лабораториях мира для моделирования нанотехнологий ( ОК-13).

б) профессиональных (ПК):

способность применять в профессиональной деятельности современные параллеьные программные системы языки программирования , методологии системы автоматизации проектирования, электронные библиотеки математических программ для современных суперкомпьютеров, библиотеки и пакеты программ, современные профессиональные стандарты информационных технологий (ПК-1)

способность профессионально решать задачи производственной и нано-технологической деятельности с учетом современных достижений науки и техники, включая: разработку алгоритмических и программных решений в области параллельного программирования; разработку математических, информационных и имитационных моделей по тематике создания новых молекулярных технологий, прикладных баз данных; разработку тестов (ПК-2)

способность понимать и применять в исследовательской и прикладной деятельности современный математический аппарат, фундаментальные концепции и системные методологии, международные и профессиональные стандарты в области информационных технологий, способность использовать современные инструментальные и вычислительные средства (ПК-4)

способность в составе научно-исследовательского и производственного коллектива, состоящего из специалистов в области математического моделирования, квантовой физики,химии и биологии решать задачи профессиональной деятельности (ПК-5)

способность применять на практике международные и профессиональные стандарты информационных технологий, современные парадигмы и методологии, инструментальные и вычислительные средства (в соответствии с профилем (подготовки) (ПК-7);

способность профессионально владеть базовыми математическими знаниями и информационными технологиями, эффективно применять их для решения научно-технических задач и прикладных задач, связанных с развитием новых нанотехнологий и использованием информационных технологий (ПК-8)

способность реализовать процессы управления качеством производственной деятельности, связанной с созданием и использованием систем информационных технологий, осуществлять мониторинг и оценку качества моделирования процессов создания новых гетерогенных молекулярных систем(ПК-12);

понимание концепций и абстракций, положенных в основу математических моделей гетерогенных молекулярных систем, способность использовать на практике базовые математические дисциплины (ПК-15)

понимание концепций и основных законов естествознания, в частности, квантовой физики, химии, биологии (ПК-16)

детальное знание методов и базовых алгоритмов обработки информационных структур, методов анализа сложности алгоритмов, важных для масштабируемой квантовой молекулярной динамики, требующей параллельных вычислений (ПК-17)

детальное знание парадигм и методологий программирования, парадигм MPI, OpenMP особенностей языков программирования общего и специального назначения, наиболее широко используемых средств параллельного программирования (ПК-18).

понимание теоретических основ и общих принципов использования профессиональных областей квантовой физики, химии, биологии (ПК-26);

способность решать задачи производственной и технологической деятельности на высоком профессиональном уровне, включая: разработку алгоритмических и программных решений в области параллельного прикладного программирования; разработку математически моделей по тематике создания новых гетерогенных молекулярных технологий, прикладных баз данных и стандартных программ квантовой химии; разработку тестов и средств тестирования систем и средств на соответствие стандартам и исходным требованиям (ПК-28);

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.ед. (108 часов): лекции – 52 часа, самостоятельная работа студента - 56 часов.

**4. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина относится к базовой части профессионального цикла. Содержание курса определяется образовательным стандартом МГУ высшего профессионального образования по направлению 010400 Прикладная математика и информатика (1 ступень –бакалавриат - двухуровневой программы интегрированный магистр, непрерывной подготовки). Изучение опирается на знание математической физики, квантовой механики, вычислительной математики и основам параллельного программирования.

Основу данного курса составляют:

создание математических моделей молекулярных систем, квантовомеханические молекулярные модели, математическая физика, дифференциальные уравнения и задачи на собственные значения, вычислительная математика, параллельное программирование.

Освоение данной дисциплины необходимо для дальнейшего изучения дисциплин свяханных с математическим моделированием задач создания новых технологий.

**5. Тематический план учебной дисциплины**

Курс посвящен изучению вычислительных моделей и алгоритмов для описания физических процессов используемых при создании новых молекулярных систем на основе нанотехнологий. Рассматриваются модели квантового уровня, молекулярной динамики и сплошной среды и их взаимное влияние. Основное внимание уделяется вычислительным аспектам и тем приближениям, которые используются в современных вычислительных кодах, позволяющих решать задачи нанотехнологий на современных параллельных супер-ЭВМ. Рассматриваются примеры применения вычислительных кодов и пакетов программ при разработке новых технологических процессов.

**Тематический план**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| п/п | Тема | Лекции (час.) | Семинары (час.) | Самостоятельная работа (час.) |
| 1 | Проблемы вычислительной физики в разработке нанотехнологий | 2 | - | 2 |
| 2 | Вычислительные модели “из первых принципов” для систем частиц на квантовом уровне | 8 | - | 6 |
| 3  4 | Вычислительные модели на основе теории функционала плотности  Пакеты программ для моделей “из первых принципов” и их возможности для решения задач вычислительных нанотехнологий. | 6  4 | -  - | 4  2 |
| 5 | Методы квантовой молекулярной динамики. | 8 | - | 4 |
| 6 | Молекулярная динамика со связями для моделирования систем макромолекул**.** | 8 | - | 4 |
| 7 | Моделирование наносистем методом Монте-Карло. | 10 | - | 6 |
| 8 | Модели сплошной среды для описания наносистем. | 6 | - | 4 |
|  | Промежуточная аттестация: экзамен | - | - | 24 |
|  | **Итого** | **52** |  | **56** |
| **Всего** | | **108 часов** | | |

**6. Формы контроля знаний. Критерии оценки знаний, навыков**

Экзамен в 8 семестре

**7. Содержание курса**

**1. Проблемы вычислительной физики в разработке нанотехнологий.**

Многомасштабные вычислительные модели для наносистем. Модели систем частиц на квантовом уровне. Модели молекулярной динамики и Монте Карло. Модели сплошной среды. Компьютер как звено технологического процесса, вычислительные нанотехнологии. Размерные эффекты в различных областях нанотехнологий и особенности вычислительных моделей процессов. Наноматериалы. Наноэлектроника. Нанохимия. Нанобиомедицина. Молекулярный конструктор. Наносенсоры. Устройства памяти. Нанолитография.

**2. Вычислительные квантовые модели “из первых принципов” для описания систем многих частиц.**

Задачи для уравнения Шредингера. Модельные потенциалы и параметры квантовых наноструктур. Постановки задач для численного моделирования кванотвых точек. Численное определение спектра кванотовомеханических систем. Точные решения для атома водорода. Представления для атомных орбиталей как базисных функций приближенных решений.

Моделирование многоэлектронных атомов. Подход Хартри-Фока для численного моделирования многоэлектронных атомов. Численные методы определения самосогласованного поля в рамках уравнений Хартри-Фока. Последовательное определение потенциалов и волновых функций. Вычисляемые параметры и средние величины важные для наносистем.

Расчет электронной структуры молекул. Поверхность потенциальной энергии молекул. Стационарное уравнение Шредингера для молекулы. Уравнения Хартри-Фока для расчета электронной структуры молекулы. Вариационные методы решения уравнений Хартри-Фока для молекул. Молекулярные орбитали. Информация, получаемая методом Хартри-Фока. Дипольные моменты. Атомные заряды. Электростатический потенциал. Геометрия молекулы. Химическая реактивность. Пост Хартри-Фоковские методы. Теория связанных кластеров. Метод конфигурационного взаимодействия.

**3.Вычислительные модели на основе теории функционала плотности.** Уравнения Кона-Шэма. Аппроксимация локальной плотности. Численное решение уравнений функционала плотности. Обобщенная градиентная аппроксимация.

Моделирование системы электронов в твердом теле. Псевдопотенциал. Разложение решения по волнам Блоха.

**4. Пакеты программ для моделей “из первых принципов” и их возможности для решения задач вычислительных нанотехнологий.**

Характеристики основных пакетов программ и возможности их использования. Терафлопсные вычисления для решения задач нанотехнологий. Примеры использования численных моделей “из первых принципов” для изучения наносистем. Устройства хранения данных. Нано-морфология. Локализация и координация примесей и дефектов в нанокристаллическом алмазе. Формирование роста гибридных углеродных наноматериалов.

**5. Методы квантовой молекулярной динамики.**

Задачи нанотехнологий, решаемые методом молекулярной динамики. Жидкие кристаллы, полимеры, протеины. Нанороботы и дизайн лекарств.

Численное решение уравнений движения частиц. Расчет макроскопических параметров. Вириальное уравнение состояния. Алгоритм молекулярной динамики.

Молекулярная динамика “из первых принципов”.

Молекулярная динамика Борна - Оппенгеймера. Молекулярная динамика Кар-Паринелло. Численный код “CPMD” реализующий оба подхода. Реализация кода “CPMD” на параллельных вычислительных машинах.

**6 Молекулярная динамика со связями для моделирования систем макромолекул.**

Расщепление сил на короткодействующие и дальнодействующие. Твердые связи в геометрии молекул. Свободные взаимодействия между атомами. Динамика сложных молекул. Учет алгебраических условий связи. Алгоритм SHAKE. Скоростная форма алгоритма Верлета. Учет условий по скорости. Алгоритм RATTLE. Описание вращений молекул. Метод матрицы вращения для решения динамических и кинетических уравнений Эйлера. Методы снятия ограничений на шаг по времени при описании быстрых колебаний молекул.

Использование программ молекулярной динамики в нанобиомедицине.

Дизайн лекарств. Вычислительная биология. Биосенсоры, наносенсоры в медицинской диагностике. Моделирование трехмерной структуры протеинов.

**7. Моделирование наносистем методом Монте-Карло.**

Алгоритм Метрополиса для систем частиц. Квантовые методы Монте-Карло для изучения наноструктур. Метод Монте-Карло для ферромагнетиков. Генетический алгоритм. Молекулярное моделирование полимерных растворов методом Монте-Карло в задаче создания фоторезиста для оптической литографии.

**8. Модели сплошной среды для описания наносистем**.

Кинетика роста нанокристаллов. Непрерывная модель размерно-зависимой твердости наноразмерных торсионных элементов. Ферромагнитизм. Уравнение Ландау-Лифшица. Движение стенок магнитных доменов в нанопроволоках в задаче создания нанопамяти.

Нелинейная модель сплошной среды для задач оптической литографии.

**Литература**

**Обязательная литература:**

1. А.М.Попов Вычислительные нанотехнологии,

Учебное пособие. – М.: МАКС Пресс, 2009. - 280 с.

2. Попов А.М. Вычислительные нанотехнологии: учебное пособие/ А.М.Попов. -М.: КНОРУС, 2014.-312c. -(Бакалавриат)

[http//popov@.cs.msu.su/Вычислительные](mailto:http//popov@.cs.msu.su/Вычислительные) нанотехнологии

**Дополнительная литература:**

1. Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology, Tditrd by Michatl Rieth and Wolfram Schommers, Karisruhe, Germany, 10-Volume Set,2006, 8000 pages.
2. Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направления исследований. Под ред. М.С.Роко, В.С.Уильямса, П.Аливисатоса. пер. англ. под ред. Р.А. Андриевского. М.:Мир, 2002
3. Алферов Ж.И. Двойные гетероструктуры: концепция применения в физике, электронике и технологии. Нобелевская лекция по физике.- Успехи физических наук .- М. 2002.- **71**.10.-967-981
4. Н.Ф. Степанов, “Квантовая механика и квантовая химия”, .- М.: изд. Мир изд. Московского университета, 2001.-519с
5. Д. Поттер, Вычислительные методы в физике, Пер. с англ. .-М.: Мир, 1975.-392 с.
6. D. Young, Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems.- John Wiley & Sons 2001
7. Daan Frenkel, Berend Smit, “Understanding Molecular Simulation” From Algorithms tp Applications.- Academic Press 2002, 638 c.
8. Car,R. and Parrinello, M. Unified approach for molecular dynamics and density functional theory.- Phys.Rev.Lett. **55**,1985,pp2471-2474
9. Сергеев Г.Б. Нанохимия: учебное пособие.- Изд. КДУ (2007),- 336 с.
10. Ч. Пул, Ф. Оуэнс. Нанотехнологии. –М.: Техносфера .2004
11. **Образовательные технологии**

Используются традиционные технологии проведения лекций и практических занятий в аудиториях, проблемные лекции с использованием сети интернет в 7 и 8 семестрах, Все материалы выложены на сайте

[**http//popov@.cs.msu.su/Вычислительные**](mailto:http//popov@.cs.msu.su/Вычислительные) **нанотехнологии**

Применяются следующие интерактивные образовательные технологии, интернет технологии проведения учебного процесса:

демонстрация расчетов молекулярных систем, основанных на разных многомасштабных моделях молекулярной динамики;

демонстрация решений квантовых задач с модельными потенциалами, интерактивное изменение формы потенциальной ямы и ее влияние на спектр квантовых точек;

визуализация и показ расчетов выполненных непосредственно на суперкомпьютере Blue Gene/P молекулярных переключателей и их использования в наноэлектронике;

демонтсрация проведения всех этапов расчета и создания образов в нанолитографии при создании новых электронных сем.

1. **Оценочные средства для текущего контроля и аттестации студента**

Экзамен в 8 семестре

Контрольные работы

**10. Учебно-методическое и информационное обеспечение. Программные средства.**

а) основная литература (имеющаяся в наличии в библиотеке МГУ и доступная в электронной библиотечной системе (ЭБС) МГУ).

1. А.М.Попов Вычислительные нанотехнологии,

Учебное пособие. – М.: МАКС Пресс, 2009. - 280 с.

2. Попов А.М. Вычислительные нанотехнологии: учебное пособие/ А.М.Попов. -М.: КНОРУС, 2014.-312c. -(Бакалавриат)

[**http//popov@.cs.msu.su/Вычислительные**](mailto:http//popov@.cs.msu.su/Вычислительные)**нанотехнологии**

Основная литература укомплектована изданиями для цикла естественнонаучных и математических дисциплин и цикла общепрофессиональных дисциплин – за последние 10 лет.

б) дополнительная литература:

1. Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology, Tditrd by Michatl Rieth and Wolfram Schommers, Karisruhe, Germany, 10-Volume Set,2006, 8000 pages.
2. Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направления исследований. Под ред. М.С.Роко, В.С.Уильямса, П.Аливисатоса. пер. англ. под ред. Р.А. Андриевского. М.:Мир, 2002
3. Алферов Ж.И. Двойные гетероструктуры: концепция применения в физике, электронике и технологии. Нобелевская лекция по физике.- Успехи физических наук .- М. 2002.- **71**.10.-967-981
4. Н.Ф. Степанов, “Квантовая механика и квантовая химия”, .- М.: изд. Мир изд. Московского университета, 2001.-519с
5. Д. Поттер, Вычислительные методы в физике, Пер. с англ. .-М.: Мир, 1975.-392 с.
6. J.Shumway and D.M. Ceperly, Quantum Monte Carlo Methods in the Study of Nanostructures, (Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology), 2004.
7. Сергеев Г.Б. Нанохимия: учебное пособие.- Изд. КДУ (2007),- 336 с.
8. Ч. Пул, Ф. Оуэнс. Нанотехнологии. –М.: Техносфера .2004

в) Используются программное обеспечение и Интернет-ресурсы, примеры суперкомпьютерных расчетов новых нано-систем. Используются уникальные графические системы, созданные на факультете ВМК, позволяющие отображать результаты создания новых наносистем непосредственно на суперкомпьютере Blue Gene/P.

**11. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Используется компьютерное оборудование с демонстрацией расчетов новых молекулярных систем, в том числе расчетов на суперкомпьютере Blue Gene/P, установленном на факультете ВМК. Используются мультимедийное оборудование и видео-аудиовизуальные средства обучения.