

ИНСТИТУТ ЛАЗЕРНЫХ И ПЛАЗМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
КАФЕДРА ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И НАНОСИСТЕМ

ОДОБРЕНО НТС ЛАПЛАЗ

Протокол № 1/04-577

от 27.04.2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ (ЧАСТЬ 1)

Направление подготовки
(специальность)

[1] 01.03.02 Прикладная математика и
информатика

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/В	СРС, час.	КСР, час.	Форма(ы) контроля, экс./зач./КР/КП
5	2	72	16	16	0		40	0	3
Итого	2	72	16	16	0	0	40	0	

АННОТАЦИЯ

Курс знакомит студентов с современными численными методами применительно к задачам физики конденсированного состояния. В Части 1 даются: Формализация квантовой механики в матричном виде, случайные распределения, Спектральные задачи в квантовой механике, одночастичные и многочастичные квантовые задач

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Научить рассчитывать реальные физические характеристики сложных взаимодействующих квантовых систем в случае, когда отсутствуют параметры малости и невозможны аналитические подходы.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Дисциплина продолжает подготовку студентов по численным методам и помогает в освоении основного курса квантовой механики.

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
УК-1 [1] – Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	З-УК-1 [1] – Знать: методики сбора и обработки информации; актуальные российские и зарубежные источники информации в сфере профессиональной деятельности; метод системного анализа У-УК-1 [1] – Уметь: применять методики поиска, сбора и обработки информации; осуществлять критический анализ и синтез информации, полученной из разных источников В-УК-1 [1] – Владеть: методами поиска, сбора и обработки, критического анализа и синтеза информации; методикой системного подхода для решения поставленных задач
УК-3 [1] – Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде	З-УК-3 [1] – Знать: основные приемы и нормы социального взаимодействия; основные понятия и методы конфликтологии, технологии межличностной и групповой коммуникации в деловом взаимодействии У-УК-3 [1] – Уметь: устанавливать и поддерживать контакты, обеспечивающие успешную работу в коллективе; применять основные методы и нормы социального взаимодействия для реализации своей роли и взаимодействия внутри команды В-УК-3 [1] – Владеть: простейшими методами и приемами социального взаимодействия и работы в команде

<p>УК-6 [1] – Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни</p>	<p>З-УК-6 [1] – Знать: основные приемы эффективного управления собственным временем; основные методики самоконтроля, саморазвития и самообразования на протяжении всей жизни У-УК-6 [1] – Уметь: эффективно планировать и контролировать собственное время; использовать методы саморегуляции, саморазвития и самообучения В-УК-6 [1] – Владеть: методами управления собственным временем; технологиями приобретения, использования и обновления социо-культурных и профессиональных знаний, умений, и навыков; методиками саморазвития и самообразования в течение всей жизни</p>
---	--

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Духовно-нравственное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование этического мышления и профессиональной ответственности ученого (В2)	1. Использование воспитательного потенциала базовых гуманитарных дисциплин. 2. Разработка новых инновационных курсов гуманитарной и междисциплинарной направленности.
Духовно-нравственное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование личностно-центрированного подхода в профессиональной коммуникации, когнитивно-поведенческих и практико-ориентированных навыков, основанных на общероссийских традиционных ценностях (В3)	1. Использование воспитательного потенциала базовых гуманитарных дисциплин. 2. Разработка новых инновационных курсов гуманитарной и междисциплинарной направленности.
Профессиональное и трудовое воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование глубокого понимания социальной роли профессии, позитивной и активной установки на ценности избранной специальности, ответственного отношения к профессиональной деятельности, труду (В14)	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин естественнонаучного и общепрофессионального модуля для: - формирования позитивного отношения к профессии инженера (конструктора, технолога), понимания ее социальной значимости и роли в обществе, стремления следовать нормам профессиональной этики посредством контекстного обучения, решения практико-ориентированных ситуационных задач. - формирования устойчивого интереса к профессиональной деятельности,

		<p>способности критически, самостоятельно мыслить, понимать значимость профессии посредством осознанного выбора тематики проектов, выполнения проектов с последующей публичной презентацией результатов, в том числе обоснованием их социальной и практической значимости; - формирования навыков командной работы, в том числе реализации различных проектных ролей (лидер, исполнитель, аналитик и пр.) посредством выполнения совместных проектов.</p> <p>2.Использование воспитательного потенциала дисциплины «Экономика и управление в промышленности на основе инновационных подходов к управлению конкурентоспособностью», «Юридические основы профессиональной деятельности» для:</p> <ul style="list-style-type: none"> - формирования навыков системного видения роли и значимости выбранной профессии в социально-экономических отношениях через контекстное обучение
<p>Профессиональное воспитание</p>	<p>Создание условий, обеспечивающих, формирование научного мировоззрения, культуры поиска нестандартных научно-технических/практических решений, критического отношения к исследованиям лженаучного толка (B19)</p>	<p>1.Использование воспитательного потенциала дисциплин/практик «Научно-исследовательская работа», «Проектная практика», «Научный семинар» для:</p> <ul style="list-style-type: none"> - формирования понимания основных принципов и способов научного познания мира, развития исследовательских качеств студентов посредством их вовлечения в исследовательские проекты по областям научных исследований. <p>2.Использование воспитательного потенциала дисциплин "История науки и инженерии", "Критическое мышление и основы научной коммуникации", "Введение в специальность", "Научно-исследовательская работа", "Научный семинар" для:</p> <ul style="list-style-type: none"> - формирования способности отделять настоящие научные исследования от лженаучных

		<p>посредством проведения со студентами занятий и регулярных бесед;</p> <p>- формирования критического мышления, умения рассматривать различные исследования с экспертной позиции посредством обсуждения со студентами современных исследований, исторических предпосылок появления тех или иных открытий и теорий.</p>
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование способности и стремления следовать в профессии нормам поведения, обеспечивающим нравственный характер трудовой деятельности и неслужебного поведения (В21)	<p>1.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для развития навыков коммуникации, командной работы и лидерства, творческого инженерного мышления, стремления следовать в профессиональной деятельности нормам поведения, обеспечивающим нравственный характер трудовой деятельности и неслужебного поведения, ответственности за принятые решения через подготовку групповых курсовых работ и практических заданий, решение кейсов, прохождение практик и подготовку ВКР. 2.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для: - формирования производственного коллективизма в ходе совместного решения как модельных, так и практических задач, а также путем подкрепление рационально-технологических навыков взаимодействия в проектной деятельности эмоциональным эффектом успешного взаимодействия, ощущением роста общей эффективности при распределении проектных задач в соответствии с сильными компетентностными и эмоциональными свойствами членов проектной группы.</p>

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Разделы учебной дисциплины, их объем, сроки изучения и формы контроля:

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практик. (семинары) / Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	<i>5 Семестр</i>						
1	Основная задача квантовой механики. Численные подходы	1-8	8/8/0		25	КИ-8	3-УК-1, У-УК-1, В-УК-1, 3-УК-3, У-УК-3, В-УК-3, 3-УК-6, У-УК-6, В-УК-6
2	Численные методы расчета квантовых систем	9-16	8/8/0		25	КИ-16	3-УК-1, У-УК-1, В-УК-1, 3-УК-3, У-УК-3, В-УК-3, 3-УК-6, У-УК-6, В-УК-6
	<i>Итого за 5 Семестр</i>		16/16/0		50		
	Контрольные мероприятия за 5 Семестр				50	3	3-УК-1, У-УК-1, В-

							УК-1, 3-УК-3, У-УК-3, В-УК-6, В-УК-3, 3-УК-6, У-УК-6
--	--	--	--	--	--	--	--

* – сокращенное наименование формы контроля

** – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

Обозначение	Полное наименование
КИ	Контроль по итогам
З	Зачет

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
	<i>5 Семестр</i>	16	16	0
1-8	Основная задача квантовой механики. Численные подходы	8	8	0
1 - 2	Формализация квантовой механики в матричном виде Задача Штурма-Лиувилля - задача на собственные значения. Основные инварианты матрицы, преобразования. Проблема обратной матрицы.	Всего аудиторных часов		
		2	2	0
		Онлайн		
3	Дискретное Фурье-преобразование в физике Квантование импульса. Примеры. Обратное пространство в физических системах. Быстрое Фурье-преобразование.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
4	Уравнения математической физики Уравнения математической физики эллиптического, параболического и гиперболического типа. Использование спектральной задачи, рядов Фурье.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
5	Сортировка, поиск Способы быстрой сортировки.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
6	Случайные распределения. Вероятность в квантовой физике. Методы получения	Всего аудиторных часов		
		1	1	0

	некоторых распределений случайной величины	Онлайн		
		0	0	0
7 - 8	Одночастичная задача Спектральные задачи в квантовой механике. Одномерные потенциальные ямы. Задача устойчивости. Узельный базис. Выбор удобного базиса. Импульсное представление. Отличие дискретного спектра от непрерывного	Всего аудиторных часов		
		2	2	0
		Онлайн		
		0	0	0
9-16	Численные методы расчета квантовых систем	8	8	0
9 - 10	Численные методы расчета квантовых систем Метод точной диагонализации (МТД). Диагонализация Хаусхолдера Метод Ланцоша. Способы расчета матричных элементов, экономной записи разреженных матриц, перемножения матриц, расчета квантовых средних. Вырожденное состояние и расчет средних в нем. Расчет с помощью МТД низших возбужденных состояний, численный спектральный анализ.	Всего аудиторных часов		
		2	2	0
		Онлайн		
		0	0	0
11 - 12	Операции над дискретным базисом Инварианты. Модель сильной связи. Импульсное преобразование и спектр сильной связи без взаимодействия. Реальные системы для численного анализа. Одномерные цепочки. Двумерные кластеры. Заполнение зон для конечных кластеров. Методы понижения гильбертова пространства за счет сохранения числа частиц, проекций спина, трансляций. Граничные условия. Влияние калибровочной фазы на антисимметрию в одномерном случае. Проблема знака перескокового члена.	Всего аудиторных часов		
		2	2	0
		Онлайн		
		0	0	0
13 - 16	Многочастичная квантовая задача Вторичное квантование, операторы рождения, уничтожения. Ферми-статистика и антикоммутация. Узельные модели в физике конденсированного состояния. Модель Хаббарда. Модель Бозе-Хаббарда. Обобщенные модели Хаббарда. Взаимосвязь узельных моделей и их предельные случаи. Связь модели Хаббарда и антиферромагнитной модели Гейзенберга (t-J модель). Соотношение между 'hard-core' Бозе-Хаббард моделью и моделью Гейзенберга. Бозе-статистика и соотношения коммутации. Базис для бозе-системы. Неполные бозе-модели.	Всего аудиторных часов		
		4	4	0
		Онлайн		
		0	0	0

Сокращенные наименования онлайн опций:

Обозначение	Полное наименование
ЭК	Электронный курс
ПМ	Полнотекстовый материал
ПЛ	Полнотекстовые лекции
ВМ	Видео-материалы
АМ	Аудио-материалы
Прз	Презентации
Т	Тесты
ЭСМ	Электронные справочные материалы

ИС	Интерактивный сайт
----	--------------------

ТЕМЫ СЕМИНАРОВ

Недели	Темы занятий / Содержание
	<i>5 Семестр</i>
1 - 2	Знакомство со средой MatLab Операторы, работа с матрицами, элементарные операции
3 - 4	Сортировка и поиск Выбор базиса. Примеры оптимальных сортировок. Поиск в отсортированном массиве.
5 - 6	Бесконечная потенциальная яма Расчет спектра и волновых функций. Сравнение с точным ответом.
7 - 8	Конечная потенциальная яма Дискретный и непрерывный спектр. Расчет корреляторов
9 - 10	Потенциальная яма в импульсном представлении Сравнение с координатным представлением.
11 - 12	Многочастичный базис Построение базисных функций и быстрый поиск. Статистика Ферми и Бозе.
13 - 14	Свободные частицы на решетке Узельная модель. Построение гамильтоновой матрицы. Расчет квантовых средних.
15 - 16	Модель Бозе-Хаббарда Расчет корреляторов. Зависимость результатов от параметра взаимодействия.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При освоении данной дисциплины основную роль играют аудиторные занятия в виде лекций и семинаров, а также самостоятельная работа студентов, заключающаяся в выполнении домашнего задания, изучении пройденного материала. Для того чтобы показать современное состояние вычислительных методов в квантовой физике, предусмотрено широкое использование современных научных работ и публикаций по данной тем. Рекомендуется посещение студентами научных семинаров и конференций, в том числе, проводимых в НИЯУ МИФИ, а также в других московских университетах и институтах.

На практических занятиях студенты осваивают среду MatLab, язык Fortran, широко используют компьютерные технологии, практически рассчитывают реальные физические системы. При обсуждении тем лекционных занятий используются презентации, обсуждения последних научных работ, новые модели в физике конденсированного состояния. Рассказываются навыки работы с научной литературой, с базой данных Physical Review, Elseiver и др. Обязательными являются самостоятельная работа студентов, выполнение индивидуальных заданий, работа с литературой.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонд оценочных средств по дисциплине обеспечивает проверку освоения планируемых результатов обучения (компетенций и их индикаторов) посредством мероприятий текущего, рубежного и промежуточного контроля по дисциплине.

Связь между формируемыми компетенциями и формами контроля их освоения представлена в следующей таблице:

Компетенция	Индикаторы освоения	Аттестационное мероприятие (КП 1)
УК-1	З-УК-1	З, КИ-8, КИ-16
	У-УК-1	З, КИ-8, КИ-16
	В-УК-1	З, КИ-8, КИ-16
УК-3	З-УК-3	З, КИ-8, КИ-16
	У-УК-3	З, КИ-8, КИ-16
	В-УК-3	З, КИ-8, КИ-16
УК-6	З-УК-6	З, КИ-8, КИ-16
	У-УК-6	З, КИ-8, КИ-16
	В-УК-6	З, КИ-8, КИ-16

Шкалы оценки образовательных достижений

Шкала каждого контрольного мероприятия лежит в пределах от 0 до установленного максимального балла включительно. Итоговая аттестация по дисциплине оценивается по 100-балльной шкале и представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках текущего и промежуточного контроля.

Итоговая оценка выставляется в соответствии со следующей шкалой:

Сумма баллов	Оценка по 4-ех балльной шкале	Оценка ECTS	Требования к уровню освоению учебной дисциплины
90-100	5 – <i>«отлично»</i>	A	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
85-89	4 – <i>«хорошо»</i>	B	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
75-84		C	
70-74		D	
65-69	3 – <i>«удовлетворительно»</i>	E	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
60-64			
Ниже 60	2 –	F	Оценка «неудовлетворительно»

	«неудовлетворительно»		выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.
--	-----------------------	--	--

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. ЭИ К81 Practical course on MatLab for foreign students : , Moscow: National Research Nuclear University MEPHI, 2018
2. ЭИ Б 30 Численные методы : учебное пособие, Москва: Лаборатория знаний, 2020
3. ЭИ Б 30 Численные методы : учебное пособие, Москва: Лаборатория знаний, 2015
4. ЭИ К31 Квантовые сильнокоррелированные системы: современные численные методы : учебное пособие для вузов, В. А. Кашурников, А. В. Красавин, Москва: МИФИ, 2007
5. 53 К31 Квантовые сильнокоррелированные системы: современные численные методы : учебное пособие для вузов, В. А. Кашурников, А. В. Красавин, Москва: МИФИ, 2007

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 519 Б30 Численные методы : учебное пособие для вузов, Москва: Бинوم. Лаборатория знаний, 2015
2. 530 Л22 Теоретическая физика Т.3 Квантовая механика. Нерелятивистская теория, , Москва: Физматлит, 2008
3. 53 Л22 Теоретическая физика Т.5 Статистическая физика. Ч.1, , Москва: Физматлит, 2005
4. 539.2 А98 Физика твердого тела Т.1 , , М.: Мир, 1979
5. 539.2 А98 Физика твердого тела Т.2 , , М.: Мир, 1979
6. 53 К31 Вычислительные методы в квантовой физике : учеб. пособие для вузов, В. А. Кашурников, А. В. Красавин, Москва: МИФИ, 2005
7. 512 П34 Технология разреженных матриц : , С. Писсанецки; Пер.с англ., М.: Мир, 1988

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

1. Freemath (<http://freemath.sourceforge.net>)

2. Компилятор Fortran (<http://gcc.gnu.org/wiki/GFortran>)

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

1. сайт кафедры №70 НИЯУ МИФИ (<http://kaf70.mephi.ru/>)

2. сайт Американского физического общества (<http://www.aps.org>)

3. сайт издательства Elsevier ()

<https://online.mephi.ru/>

<http://library.mephi.ru/>

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Специальное материально-техническое обеспечение не требуется

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ

При изучении курса необходимо твердо усвоить современные численные методы расчета квантовых систем – метод точной диагонализации Гамильтоновой матрицы, квантовый и классический методы Монте-Карло. Для достижения этого студент должен уметь формулировать модельный гамильтониан и его представление в виде матрицы или стохастической схемы, владеть современным математическим и физическим аппаратом в области физики конденсированного состояния, быть в состоянии продемонстрировать точный численный расчет сильно взаимодействующей квантовой системы с расчетом физических характеристик. Для освоения материала курса необходимо иметь предварительные знания по линейной алгебре, алгебре операторов, по статистической физике, термодинамике и квантовой механике. Необходимо изучить математический аппарат вторичного квантования, схемы построения Гамильтоновой матрицы для различного типа квантовых статистик. Необходимо уметь из данных численного расчета получать физические характеристики системы. При расчете методами Монте-Карло знать корректный способ расчета термодинамических средних. Знать принцип детального баланса и уметь использовать его при построении эргодической численной схемы расчета. Следует уметь оценивать погрешность и проводить автокорреляционный анализ. Иметь представление о квантовых методах Монте-Карло и их классификацию.

На практических занятиях студенты осваивают среду MatLab, язык Fortran, широко используют компьютерные технологии, практически рассчитывают реальные физические системы. При обсуждении тем лекционных занятий используются презентации, обсуждения последних научных работ, новые модели в физике конденсированного состояния. Даются навыки работы с научной литературой, с базой данных Physical Review, Elsevier и др. Обязательными являются самостоятельная работа студентов, выполнение индивидуальных заданий, работа с литературой.

11. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

Необходимо дать студентам возможность усвоить современные численные методы расчета конечных квантовых систем – метод точной диагонализации Гамильтоновой матрицы, квантовый и классический методы Монте-Карло. Для достижения этого следует рассказать об основных моделях сильнокоррелированных систем для различных квантовых статистик – модели Хаббард, Бозе-Хаббард, спиновые модели и различные их модификации. Следует сформулировать представление о модельном гамильтониане и показать его представление в виде матрицы. Следует для освоения материала курса вспомнить базовые знания студентов по линейной алгебре, алгебре операторов, по статистической физике, термодинамике и квантовой механике. Для освоения метода точной диагонализации необходимо научить формализму математического аппарата вторичного квантования. Важно рассказать о базисе чисел заполнения, о представлении физических операторов в этом базисе. Необходимо научить схемам построения Гамильтоновой матрицы для различного типа квантовых статистик. Необходимо научить, как уметь из данных численного расчета получать физические характеристики системы. При обсуждении методов Монте-Карло рассказать корректный способ расчета термодинамических средних. Необходимо подробно рассказать принцип детального баланса и показать. Как его использовать при построении эргодической численной схемы расчета. Научить корректной оценке погрешности расчета и принципам автокорреляционного анализа. Дать представление о квантовых методах Монте-Карло и их классификацию

Автор(ы):

Кашурников Владимир Анатольевич, д.ф.-м.н.,
профессор

Красавин Андрей Валерьевич, к.ф.-м.н., доцент