Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ИНСТИТУТ ЛАЗЕРНЫХ И ПЛАЗМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

КАФЕДРА ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И НАНОСИСТЕМ

ОДОБРЕНО УМС ЛАПЛАЗ

Протокол № 01/08-577

от 28.08.2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ (ЧАСТЬ 2)

Направление подготовки (специальность) [1] 03.03.01 Прикладные математика и физика

Семестр	**Трудоемкость, кред.**	**Общий объем курса, час.**	**Лекции, час.**	**Практич. занятия, час.**	**Лаборат. работы, час.**	**В форме практической подготовки, час.**	**СРС, час.**	**КСР, час.**	**Форма(ы) контроля, экз./зач./КР/КП**
6	4	144	15	15	30		30	0	Э
Итого	4	144	15	15	30	0	30	0	

АННОТАЦИЯ

Курс знакомит студентов с современными численными методами применительно к задачам физики конденсированного состояния. Даются: Квантовая модель Гейзенберга, квантовая статистика невзаимодействующих систем, методы Монте-Карло для физических систем.

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**

Профессиональные компетенции в соответствии с задачами и объектами (областями знаний) профессиональной деятельности:

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	**Объект или область знания**	**Код и наименование профессиональной компетенции; Основание (профессиональный стандарт-ПС, анализ опыта)**	**Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции**
научно-исследовательский			
Проведение научных и аналитических исследований по отдельным разделам (этапам, заданиям) темы (проекта) в рамках предметной области по профилю специализации в соответствии с утвержденными планами и	Деятельность по разработке материалов, покрытий, приборов.	ПК-14.2 [1] - Способен проводить научные исследования в области физики конденсированного состояния вещества с целью разработки полупроводниковых, сверхпроводниковых, тонкопленочных и наноструктурированных материалов,	З-ПК-14.2[1] - знать основные современные достижения физики твердого тела и возможности современной экспериментальной техники; основы физической оптики, теорию интерференции,

методиками исследований. участие в проведении наблюдений и измерений, выполнении эксперимента и обработке данных с использованием современных компьютерных технологий; участие в проведении теоретических исследований, построении физических, математических и компьютерных моделей изучаемых процессов и явлений, в проведении аналитических исследований в предметной области по профилю специализации; участие в создании новых методов и технических средств исследований и новых разработок, участие во внедрении результатов исследований и разработок.		сверхпроводящих устройств и оптоэлектронных приборов; в области оптического приборостроения, оптических материалов и технологий; в области лазерной физики с целью создания новых эталонов, методик ведения измерений и средств измерений с их последующей аттестацией и вводом в реестр средств измерений для нужд нанометрологии *Основание:* Профессиональный стандарт: 25.049	дифракции, основы атомной и молекулярной спектроскопии; способы и методы создания новых эталонов.; У-ПК-14.2[1] - уметь построить математическую модель явления, рассчитать схему эксперимента, провести оценки параметров материалов, выбрать необходимые материалы и методики для решения конкретных задач с учетом дальнейшего применения в сфере научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области физики конденсированного состояния вещества и средств измерений.; В-ПК-14.2[1] - владеть основами спектроскопии атомов и молекул, методиками ведения измерений и средств измерений; методами получения, анализа и описания параметров и характеристик процессов в экспериментальных установках физики твердого тела и лазерной физики.
конструкторско-технологический			
участие в разработке	модели, методы и	ПК-7 [1] - Способен к	З-ПК-7[1] - Знать

новых алгоритмов и компьютерных программ для научно-исследовательских и прикладных целей	средства фундаментальных и прикладных исследований и разработок в области суперкомпьютерного моделирования инженерно-физических процессов в науке, технике, технологиях, а также в сферах наукоемкого производства	разработке прикладного программного обеспечения для проведения научных исследований *Основание:* Профессиональный стандарт: 06.001, 29.004	текущее положение современных научных достижений, современные методы и алгоритмы для разработки и адаптации прикладного программного обеспечения для проведения научных исследований. ; У-ПК-7[1] - Уметь применять современные методы и алгоритмы для разработки наукоемкого программного обеспечения.; В-ПК-7[1] - Владеть навыками разработки и адаптации прикладного программного обеспечения для проведения научных исследований.
экспертно-аналитический			
участие в проведении теоретических исследований, построении физических, математических и компьютерных моделей изучаемых процессов и явлений, в проведении аналитических исследований в области суперкомпьютерного моделирования инженерно-физических процессов	модели, методы и средства фундаментальных и прикладных исследований и разработок в области суперкомпьютерного моделирования инженерно-физических процессов в науке, технике, технологиях, а также в сферах наукоемкого производства	ПК-10 [1] - Способен к аналитической и количественной оценке процессов в природе, технике и обществе и к выбору на их основе путей решения теоретических и практических проблем природного, экологического, технико-технологического характера *Основание:* Профессиональный стандарт: 26.003, 40.008, 40.011	З-ПК-10[1] - Знать основные методики, цели и задачи построения аналитических и количественных моделей процессов в природе, технике и обществе. ; У-ПК-10[1] - Уметь строить аналитические и количественные модели процессов в природе, технике и обществе и выбирать на их основе путей решения теоретических и практических

			проблем природного, экологического, технико-технологического характера. ; В-ПК-10[1] - Владеть навыками построения аналитических и количественных моделей процессов в природе, технике и обществе и выбора на их основе путей решения теоретических и практических проблем природного, экологического, технико-технологического характера

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	**Задачи воспитания (код)**
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование ответственности за профессиональный выбор, профессиональное развитие и профессиональные решения (В18)
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование навыков коммуникации, командной работы и лидерства (В20)
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование творческого инженерного/профессионального мышления, навыков организации коллективной проектной деятельности (В22)

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

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

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практ. (семинары)/ Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	6 Семестр						
1	Термодинамика	1-8	8/8/16		25	КИ-8	З-ПК-7, У-ПК-7, В-ПК-7, З-ПК-10, У-ПК-10, В-ПК-10, З-ПК-14.2, У-ПК-14.2, В-ПК-14.2
2	Методы Монте-Карло	9-15	7/7/14		25	КИ-15	З-ПК-7, У-ПК-7, В-ПК-7, З-ПК-10, У-ПК-10, В-ПК-10, З-ПК-14.2, У-ПК-14.2, В-ПК-14.2
	Итого за 6 Семестр		15/15/30		50		
	Контрольные мероприятия за 6 Семестр				50	Э	З-ПК-7, У-ПК-7, В-ПК-7, З-ПК-10, У-ПК-10, В-ПК-10, З-ПК-14.2, У-ПК-14.2, В-ПК-14.2

* – 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
Э	Экзамен

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек.,	Пр./сем.,	Лаб.,

		час.	час.	час.
	6 Семестр	15	15	30
1-8	**Термодинамика**	8	8	16
1 - 2	**Квантовая модель Гейзенберга** Квантовая модель Гейзенберга. Спиновая статистика. Псевдобозоны. Инварианты и матричные элементы. Ферромагнитное и антиферромагнитное состояния	Всего аудиторных часов		
		2	2	4
		Онлайн		
		0	0	0
3 - 4	**Термодинамика** Статистическая сумма, энергия, энтропия, теплоемкость системы. Расчет простейших термодинамических средних на примере одномерных бозе-систем с неполной статистикой.	Всего аудиторных часов		
		2	2	4
		Онлайн		
		0	0	0
5 - 6	**Квантовая статистика невзаимодействующей системы** Распределения Больцмана, Ферми и Бозе. Плотность состояний.	Всего аудиторных часов		
		2	2	4
		Онлайн		
		0	0	0
7 - 8	**Стохастическое моделирование** Нормальное распределение и центральная предельная теорема. Понятие о методах Монте-Карло. Расчет интегралов	Всего аудиторных часов		
		2	2	4
		Онлайн		
		0	0	0
9-15	**Методы Монте-Карло**	7	7	14
9 - 10	**Классические методы Монте-Карло для физических систем** Принцип детального равновесия. Алгоритм Метрополиса. Построения эргодической схемы, марковские цепочки.	Всего аудиторных часов		
		2	2	4
		Онлайн		
		0	0	0
11	**Термодинамика и статистика для конечной системы** Модель Изинга. Расчет магнитного момента, теплоемкости, восприимчивости в модели Изинга. Оценка погрешности. Автокорреляционный анализ.	Всего аудиторных часов		
		1	1	2
		Онлайн		
		0	0	0
12 - 13	**Высокотемпературное разложение** Методы расчета с помощью высокотемпературного разложения и алгоритма "червя". Представление операторов физических величин в новом базисе.	Всего аудиторных часов		
		2	2	4
		Онлайн		
		0	0	0
14 - 15	**Квантовые алгоритмы Монте-Карло** Разложение Троттера. Траекторный (world-line) алгоритм. Пример одномерных бесспиновых фермионов, Бозе-Хаббард модели, двумерной модели Эмери. Решетка ‘checkboard’ для траекторного алгоритма для обычной модели Хаббарда. Расчеты диагональных и недиагональных в числах заполнения операторов. Minus Sign Problem для фермионных степеней свободы. Расчет функции Грина.	Всего аудиторных часов		
		2	2	4
		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**
	6 Семестр
1 - 2	**Многочастичный базис** Модель Бозе-Хаббарда. Повторение
3	**Спиновые системы** Построение базиса и гамильтоновой матрицы. Модель Гейзенберга.
4	**Температура** Расчет термодинамических средних
5 - 6	**Свободный Ферми-газ** Термодинамика и статистика.
7	**Случайные распределения** Алгоритмы получения случайных величин с заданным законом распределения.
8	**Интегрирование методом Монте-Карло** Определенные интегралы
9	**Алгоритм Метрополиса** Принцип детального баланса. Марковские цепочки.
10 - 11	**Метод Монте-Карло для модели Изинга и решеточной модели.** Одномерная модель Изинга. Метод Монте-Карло. Двумерная модель Изинга. Метод Монте-Карло для модели решеточного газа.
12	**Расчет погрешностей** Автокорреляционный анализ.
13 - 15	**Квантовые методы Монте-Карло** Алгоритм шахматной доски для модели Хаббарда. Расчет матричных элементов. Схема алгоритма. Алгоритм шахматной доски для модели Хаббарда. Расчет физических величин. Прием домашнего задания.

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, выполнении курсовых работ. 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 рамках Научной сессии 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)**
ПК-10	З-ПК-10	Э, КИ-8, КИ-15
	У-ПК-10	Э, КИ-8, КИ-15
	В-ПК-10	Э, КИ-8, КИ-15
ПК-14.2	З-ПК-14.2	Э, КИ-8, КИ-15
	У-ПК-14.2	Э, КИ-8, КИ-15
	В-ПК-14.2	Э, КИ-8, КИ-15
ПК-7	З-ПК-7	Э, КИ-8, КИ-15
	У-ПК-7	Э, КИ-8, КИ-15
	В-ПК-7	Э, КИ-8, КИ-15

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:

<table>
<tr><th>Сумма баллов</th><th>Оценка по 4-х балльной шкале</th><th>Отметка о зачете</th><th>Оценка ECTS</th></tr>
<tr><td>90-100</td><td>5 – «отлично»</td><td rowspan="7">«зачтено»</td><td>A</td></tr>
<tr><td>85-89</td><td rowspan="3">4 – «хорошо»</td><td>B</td></tr>
<tr><td>75-84</td><td>C</td></tr>
<tr><td>70-74</td><td rowspan="2">D</td></tr>
<tr><td>65-69</td><td rowspan="2">3 – «удовлетворительно»</td></tr>
<tr><td>60-64</td><td>E</td></tr>
<tr><td>ниже 60</td><td>2 – «неудовлетворительно»</td><td>«не зачтено»</td><td>F</td></tr>
</table>

Оценка «отлично» соответствует глубокому и прочному освоению материала программы обучающимся, который последовательно, четко и логически стройно излагает свои ответы, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответах материалы монографической литературы.

Оценка «хорошо» соответствует твердым знаниям материала обучающимся, который грамотно и, по существу, излагает свои ответы, не допуская существенных неточностей.

Оценка «удовлетворительно» соответствует базовому уровню освоения материала обучающимся, при котором освоен основной материал, но не усвоены его детали, в ответах присутствуют неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности.

Отметка «зачтено» соответствует, как минимум, базовому уровню освоения материала программы, при котором обучающийся владеет необходимыми знаниями, умениями и навыками, умеет применять теоретические положения для решения типовых практических задач.

Оценку «неудовлетворительно» / отметку «не зачтено» получает обучающийся, который не знает значительной части материала программы, допускает в ответах существенные ошибки, не выполнил все обязательные задания, предусмотренные программой. Как правило, такие обучающиеся не могут продолжить обучение без дополнительных занятий.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. ЭИ К81 Practical course on MatLab for foreign students : , Krasavin A.V., Zhumagulov Ya.V., Moscow: National Research Nuclear University MEPhI, 2018

2. 53 К31 Квантовые сильнокоррелированные системы: современные численные методы : учебное пособие для вузов, Красавин А.В., Кашурников В.А., Москва: МИФИ, 2007

3. ЭИ К31 Квантовые сильнокоррелированные системы: современные численные методы : учебное пособие для вузов, Красавин А.В., Кашурников В.А., Москва: МИФИ, 2007

4. ЭИ Б 30 Численные методы : учебное пособие, Кобельков Г. М., Бахвалов Н. С. , Жидков Н. П., Москва: Лаборатория знаний, 2020

5. 519 Б30 Численные методы : учебное пособие для вузов, Жидков Н.П., Кобельков Г.М., Бахвалов Н.С., Москва: Бином. Лаборатория знаний, 2015

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 53 К31 Вычислительные методы в квантовой физике : учеб. пособие для вузов, Красавин А.В., Кашурников В.А., Москва: МИФИ, 2005

2. 530 Л22 Теоретическая физика Т.3 Квантовая механика. Нерелятивистская теория, Ландау Л.Д., Москва: Физматлит, 2024

3. 53 Л22 Теоретическая физика Т.5 Статистическая физика. Ч.1, Ландау Л.Д., Москва: Физматлит, 2005

4. 539.2 А98 Физика твердого тела Т.1 , Ашкрофт Н. , М.: Мир, 1979

5. 539.2 А98 Физика твердого тела Т.2 , Ашкрофт Н. , М.: Мир, 1979

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

1. Freemat (http://freemat.sourceforge.net)

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

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

1. сайт Американского физического общества (http://www.aps.org)

2. 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 «Вычислительные методы квантовой физики» 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 сильновзаимодействующей 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, Elseiver 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