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 1)

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
5	3	108	16	32	32		28	0	З
Итого	3	108	16	32	32	0	28	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**

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			
разработка математических моделей, технологий для решения инженерных, технических и информационных задач	модели, методы и средства фундаментальных и прикладных исследований и разработок в области суперкомпьютерного моделирования инженерно-физических процессов в науке, технике, технологиях, а также в	ПК-3 [1] - Способен применять численные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений для различных физико-технических задач *Основание:* Профессиональный стандарт: 06.001,	З-ПК-3[1] - Знать численные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений для различных физико-технических задач. ; У-ПК-3[1] - Уметь применять численные методы решения

	сферах наукоемкого производства	40.011	дифференциальных и интегральных уравнений для различных физико-технических задач.; В-ПК-3[1] - Владеть навыками решения дифференциальных и интегральных уравнений численными методами для физико-технических задач.
конструкторско-технологический			
участие в разработке новых алгоритмов и компьютерных программ для научно-исследовательских и прикладных целей	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-7 [1] - Способен к разработке прикладного программного обеспечения для проведения научных исследований *Основание:* Профессиональный стандарт: 06.001, 29.004	З-ПК-7[1] - Знать 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.

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	**Задачи воспитания (код)**
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование научного мировоззрения, культуры поиска нестандартных научно-технических/практических решений, критического

	отношения к исследованиям лженаучного толка (В19)
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование навыков коммуникации, командной работы и лидерства (В20)

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
	5 Семестр						
1	Основная задача квантовой механики. Численные подходы	1-8	8/16/16		25	КИ-8	З-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3, З-ПК-7, У-ПК-7, В-ПК-7
2	Численные методы расчета квантовых систем	9-16	8/16/16		25	КИ-16	З-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3, З-ПК-7, У-ПК-7, В-ПК-7
	Итого за 5 Семестр		16/32/32		50		
	Контрольные мероприятия за 5 Семестр				50	З	З-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3, З-ПК-7, У-ПК-7, В-ПК-7

* – 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.
	5 Семестр	16	32	32
1-8	**Основная задача квантовой механики. Численные подходы**	8	16	16
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	4	4
		Онлайн		
		0	0	0
3	**Дискретное Фурье-преобразование в физике** Квантование импульса. Примеры. Обратное пространство в физических системах. Быстрое Фурье-преобразование.	Всего аудиторных часов		
		1	2	2
		Онлайн		
		0	0	0
4	**Уравнения математической физики** Уравнения математической физики эллиптического, параболического и гиперболического типа. Использование спектральной задачи, рядов Фурье.	Всего аудиторных часов		
		1	2	2
		Онлайн		
		0	0	0
5	**Сортировка, поиск** Способы быстрой сортировки.	Всего аудиторных часов		
		1	2	2
		Онлайн		
		0	0	0
6	**Случайные распределения.** Вероятность в квантовой физике. Методы получения некоторых распределений случайной величины	Всего аудиторных часов		
		1	2	2
		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	4	4
		Онлайн		
		0	0	0
9-16	**Численные методы расчета квантовых систем**	8	16	16
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	4	4
		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	Всего аудиторных часов		
		2	4	4
		Онлайн		
		0	0	0

	условия. Влияние калибровочной фазы на антисимметрию в одномерном случае. Проблема знака перескокового члена.			
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	8	8
		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 ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

Недели	**Темы занятий / Содержание**
	5 Семестр
1 - 8	**Лабораторные работы** Выполняются следующие работы: 1. Сортировка и поиск. Быстрая сортировка. 2. Случайные распределения. Метод обратной функции. 3. Спектральные задачи в квантовой механике. Уровни энергии одномерной квантовой ямы.
9 - 16	**Лабораторные работы** Выполняются следующие работы: 4. Метод точной диагонализации, методы Хаусхолдера и Ланцоша 5. Операции над дискретным базисом, вторичное квантование, работа с разреженными матрицами 6. Расчёт матрицы оператора Гамильтона для узельной модели

ТЕМЫ СЕМИНАРОВ

Недели	**Темы занятий / Содержание**

	5 Семестр
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)**
ПК-3	З-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16
	У-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16
	В-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16

ПК-7	З-ПК-7	З, КИ-8, КИ-16
	У-ПК-7	З, КИ-8, КИ-16
	В-ПК-7	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:

<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="6">«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. ЭИ Б 30 Численные методы : учебное пособие, Кобельков Г. М., Бахвалов Н. С. , Жидков Н. П., Москва: 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. 512 П34 Технология разреженных матриц : , Писсанецки С., М.: Мир, 1988

5. 539.2 А98 Физика твердого тела Т.1 , Ашкрофт Н. , М.: Мир, 1979

6. 539.2 А98 Физика твердого тела Т.2 , Ашкрофт Н. , М.: Мир, 1979

7. 519 Б30 Численные методы : учебное пособие для вузов, Жидков Н.П., Кобельков Г.М., Бахвалов Н.С., Москва: Бином. Лаборатория знаний, 2015

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

1. Freemat (http://freemat.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 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