

Программа учебной дисциплины «Аналитические и численные методы моделирования элементов и материалов нанoeлектроники»

Утверждена
Академическим советом ООП
Протокол № 4 от «29» 08 2019 г.

Авторы	Ихсанов Р.Ш., к.ф.-м.н., доцент Новиков С.В., д.ф.-м.н., профессор
Число кредитов	4
Контактная работа (час.)	48
Самостоятельная работа (час.)	104
Курс, Образовательная программа	1, Электроника и нанoeлектроника
Формат изучения дисциплины	без использования онлайн курса

I. ЦЕЛЬ, РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И ПРЕРЕКВИЗИТЫ

Целями освоения дисциплины «Аналитические и численные методы моделирования элементов и материалов нанoeлектроники» является усвоение студентами методов моделирования, наиболее востребованных в физике и инженерной практике.

В результате освоения дисциплины «Аналитические и численные методы моделирования элементов и материалов нанoeлектроники» студент приобретает следующие компетенции:

- способен решать проблемы в профессиональной деятельности на основе анализа и синтеза (УК-3);
- способен работать с информацией: находить, оценивать и использовать информацию из различных источников, необходимую для решения научных и профессиональных задач (в том числе на основе системного подхода) (УК-5).

Изучение дисциплины «Аналитические и численные методы моделирования элементов и материалов нанoeлектроники» базируется на следующих дисциплинах:

- общая физика;
- уравнения математической физики;
- вычислительная математика
- теория вероятностей и математическая статистика.

Основные положения дисциплины должны быть использованы в дальнейшем при изучении следующих дисциплин:

- 1 Физика твердого тела
- 2 Прикладная сверхпроводимость и магнетизм

II. СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Раздел дисциплины	Объем в часах	Планируемые результаты обучения (ПРО), подлежащие контролю	Формы контроля
	лк		
	пз		
	ср		
Раздел 1. Моделирование физических явлений.	10	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - общую методологию математического моделирования физических явлений в физике и технике; - дифференциальные уравнения, которые лежат в основе базовых разделов физики: механики, электродинамики, теплофизики, квантовой механики; - величины, которые используются в физике и технике для постановки задачи математического моделирования и интерпретации его результатов; - принципы работы и методы программирования математических пакетов Comsol, Mathcad, Matlab. <p>Уметь: ставить задачи математического моделирования физических явлений;</p> <ul style="list-style-type: none"> - работать с математическими пакетами Mathcad, Matlab, Comsol; - программировать на языках систем Comsol, Mathcad и Matlab. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - навыками построения математических моделей в сфере профессиональной деятельности; - навыками поиска необходимой справочной информации в справочниках физических величин и сети Internet; - навыками работы с оконным интерфейсом математических пакетов Comsol, Mathcad, Matlab; - навыками отображения рассчитанных величин на графиках. 	<p>Домашнее задание, часть 1. 7-10 с..</p> <p>Выступление на практических занятиях.</p>
	14		
	52		

Раздел 2. Методы статистического моделирования (методы Монте Карло)	10	Знать: основные методы статистического моделирования. Уметь: сформулировать задачу моделирования; - выбрать наиболее подходящий метод статистического моделирования; написать необходимую программу. Владеть: методикой метода моделирования и анализа полученных результатов; -представлением результатов в графическом виде.	Домашнее задание, часть 2. 7-10 с. Выступление на практических занятиях. Устный экзамен
	14		
	52		
Часов по видам учебных занятий:	20		
	28		
	104		
Итого часов:	152		

Формы учебных занятий: лк – лекции в аудитории; пз - практические занятия; ср – самостоятельная работа студента.

Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Моделирование физических явлений.

Тема 1. Основы работы с пакетом Mathcad.

Начальные сведения о возможностях пакета Mathcad. Интерфейс пользователя: области и меню. Входной язык системы MathCAD. Типы данных. Операторы системы MathCAD.

Простые вычисления. Определения и переменные. Сохранение файлов в Mathcad. Двумерные графики в декартовой системе координат. Графики в трехмерном пространстве.

Тема 2. Расчеты физических процессов в пакете Mathcad.

Возможности символьного процессора MathCAD. Операторы численного дифференцирования и интегрирования. Векторные функции. Функции для работы с матрицами. Системы линейных алгебраических уравнений. Функции линейной и сплайновой аппроксимации.

Решение алгебраических уравнений и систем. Решение дифференциальных уравнений и систем.

Блочный-иерархический подход к проектированию, математические модели. Классификация математических моделей.

Расчет характеристик носителей заряда в полупроводниках. Моделирование процессов, связанных с неравновесными носителями заряда в полупроводниках. Квазиуровни Ферми.

Решение уравнений теплопроводности и диффузии на различной геометрии расчетной области. Диффузионно-дрейфовая модель физики полупроводников.

Моделирование контактных явлений в полупроводниках. Контакт металл-

полупроводник. Электронно-дырочный переход.

Тема 3. Основы работы с пакетом Matlab.

Командное окно. Операции с числами. Типы данных. Арифметические операторы. Операции с массивами.

Программирование в среде MATLAB. Управляющие операторы. Логические операторы. Операторы цикла. Встроенные функции в среде Matlab. Создание собственных функций. М-файлы.

Графика в Matlab: двумерные и трехмерные графики, функции специальной графики.

Тема 4. Пакеты расширения Matlab.

Обзор пакетов, входящих в состав среды Matlab: Simulink, Optimization Toolbox, Statistics Toolbox, PDE Toolbox и т.д. Принципы работы пакетов, разбор основных возможностей некоторых пакетов.

Тема 5. Основы работы с пакетом Comsol Multiphysics.

Среда Comsol Multiphysics 3.5a. Навигатор моделей. Рабочая среда программы.

Постановка задачи, ее решение и визуализация.

Стационарные задачи. Граничные условия. Нестационарные задачи. Начальные условия.

Дифференциально-алгебраические системы уравнений.

Задачи на собственные значения.

Расчет характеристик основных полупроводниковых приборов: диод, биполярный и полевой транзисторы. Аналитические приближения и численные расчеты. Сравнение результатов применения различных методов.

Тема 6. Мультифизический режим и дополнительные модули Comsol Multiphysics.

Реализация мультифизического режима. Задачи с изменяющейся геометрией.

Формы уравнений: коэффициентная, генеральная, слабая.

Дополнительные модули Comsol Multiphysics: Electromagnetics (электродинамика), Heat transfer (теплоперенос), Structural mechanics (анализ структурных деформаций), Chemical engineering (процессы переноса массы и энергии с учетом кинетики химических реакций).

Раздел 2. Методы статистического моделирования (методы Монте Карло)

Тема 7. Введение в стохастическое моделирование. Основные понятия методов Монте Карло, история возникновения метода, типичные области приложения.

Определение основных понятий и предмета методов стохастического моделирования (методов Монте Карло). История возникновения метода, ее тесная связь с возникновением и развитием вычислительной техники. Описание основных задач, пригодных для решения методами Монте Карло.

Тема 8. Случайные числа. Генерация псевдослучайных чисел на ЭВМ.

Понятие случайного числа, описание разнообразных методов генерации случайных чисел. Генерация случайных чисел на ЭВМ, генераторы равномерного распределения как основа прочих классов генераторов.

Генерация неравномерных распределений. Метод преобразования случайной переменной, многомерные методы и др. Конкретные примеры генерации часто встречающихся распределений: экспоненциальное и гауссово распределения. Генерация многомерных случайных распределений.

Тема 9. Применение методов Монте Карло в математике и физике.

Обзор задач, наиболее подходящих для исследования методами стохастического моделирования: вычисление многомерных интегралов, транспортные задачи, перколяционные задачи. Типичные постановки задач, выбор наиболее подходящих методов решения.

Тема 10. Оценка точности метода Монте Карло, ускорение сходимости, реализация алгоритмов вычислений.

Оценка точности метода Монте Карло, сравнение вычислительных затрат с другими конкурирующими методами. Подробное обсуждение реализации алгоритмов вычислений.

Тема 11. Моделирование транспорта носителей зарядов в аморфных материалах методом Монте Карло: подробное рассмотрение конкретной задачи нанoeлектроники.

Подробное рассмотрение конкретной физической задачи моделирования транспорта носителей заряда в аморфных материалах. Построение конкретных реализаций случайной среды для различных моделей аморфного материала. Моделирование стохастической динамики носителя заряда для каждой построенной реализации, усреднение по носителям и реализациям. Расчет конкретных физических величин (средней скорости носителя, коэффициента диффузии и пр.)

III. ОЦЕНИВАНИЕ

Формы контроля знаний студентов

Тип контро-ля	Форма контроля	1 год, модуль		Параметры
		1	2	
Текущий	Контроль активности на практических занятиях	*	*	Ответы на вопросы, решение задач, участие в дискуссиях
Текущий	Домашнее задание в 2-х частях	*	*	Написание работающей программы, срок сдачи: 15 неделя
Итоговый	Экзамен		*	Устный экзамен, 2 вопроса в билете

Текущий контроль предусматривает:

- учет активности студентов в ходе проведения практических занятий, выступления, участие в дискуссиях, консультации с преподавателями по выполнению домашнего задания и т.п.;
- выполнение домашнего задания;

Промежуточный контроль не предусмотрен.

Итоговый контроль в форме экзамена проводится в устной форме.

Для домашнего задания студент должен продемонстрировать владение аналитическими и численными методами, а также умение методы программно реализовывать и применять полученные навыки.

Критерии оценки знаний, умений и навыков

Активность на практических занятиях оценивается по следующим критериям, соответствующим компетенциям в разделе 3:

- ответы на вопросы, предлагаемые преподавателем;
- разбор ситуаций у доски;
- участие в дискуссии по предложенной проблематике;
- активность в проводимых обсуждениях;
- интенсивность консультаций с преподавателем по выполнению домашнего задания.

Домашнее задание оценивается по следующим критериям, соответствующим компетенциям в разделе 3:

- соблюдение структуры работы согласно заданию;
- правильность, полнота и обоснованность многокритериального выбора технических решений;
- правильность, полнота и обоснованность синтеза технических решений;
- способность аргументировано объяснять на защите работы её выполнение.

Оценки по всем формам текущего контроля выставляются по 10-ти балльной шкале.

Текущий контроль осуществляется по активности студента на практических занятиях и по выполнению домашнего задания.

Итоговый экзамен по дисциплине проводится в форме устного экзамена в конце изучения курса после 2 модуля в присутствии преподавателя. На экзамене студент выбирает экзаменационный билет, который составляется с учетом пройденного материала, как на лекционных, так и на практических занятиях, и содержит два теоретических вопроса. Ответы на предложенные вопросы излагаются в устной форме. После ответа студента преподаватель может ему задать уточняющие вопросы по тематике билета.

В остальных случаях на экзамене:

Студент выбирает экзаменационный билет, который содержит два вопроса по пройденному материалу, как на лекционных, так и на практических занятиях. Ответы на предложенные вопросы излагаются в устной форме.

Время подготовки к ответу на вопросы экзамена – 20 мин, в случае, если вопросов четыре – 40 мин. По желанию студента и согласию преподавателя возможен досрочный ответ.

Оценки по всем формам текущего и итогового контроля выставляются по 10-ти балльной шкале.

Оценки складываются из:

- **накопленной оценки (Н)**, которая формируется по десятибалльной шкале (с учетом правил округления до целого числа баллов) как взвешенная сумма полученных оценок всех форм текущего контроля, предусмотренных рабочим учебным планом данного модуля. Накопленная оценка рассчитывается по формуле:

$$H = 0,3C + 0,7Дз,$$

где Дз – оценка за домашние работы; С – средняя арифметическая оценок за работу на практических занятиях.

- **оценки за экзамен (Э)**, которая выставляется по десятибалльной шкале по итогам сдачи экзамена в устной форме.
- **результатирующая оценка (Р)** является взвешенной суммой накопленной оценки (Н) и оценки за экзамен (Э):

$$P = 0,7H + 0,3Э$$

Для итогового контроля (экзамена) студент должен продемонстрировать знание основных теоретических положений дисциплины.

Оценки за домашние работы и экзамен являются блокирующими, т.е. если за какую либо домашнюю работу (2 домашних работы) или экзамен получена неудовлетворительная оценка (0, 1, 2, 3), то итоговая оценка за курс выставляется 0 баллов.

Сдавать домашние работы можно в течение полугодия. Последняя сдача домашних работ происходит на экзамене. Передача домашних работ производится во время пере-сдачи экзамена.

Таблица соответствия оценок по десятибалльной и пятибалльной системам

По десятибалльной шкале	По пятибалльной шкале
1 – неудовлетворительно 2 – очень плохо 3 – плохо	неудовлетворительно – 2
4 – удовлетворительно 5 – весьма удовлетворительно	удовлетворительно – 3
6 – хорошо 7 – очень хорошо	хорошо – 4
8 – почти отлично 9 – отлично 10 – блестяще	отлично – 5

Округление оценки итогового контроля производится до целой величины (при дробной части большей или равной 0.5 - в сторону увеличения, при меньшей 0.5 – в сторону уменьшения).

IV. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

Примеры заданий для домашней работы

Стохастические процессы

1. Построить генератор случайных чисел с плотностью распределения $p(x) \propto x^2$ в интервале от 0 до 2.
2. Методом Монте Карло вычислить площадь между кривой $p(x) = 2-x^2$ и осью абсцисс с относительной точностью 0.001 .
3. Проверить выполнимость центральной предельной теоремы для случайных чисел с плотностью распределения $p(x) \propto x$ в интервале от 0 до 1.

Моделирование физических явлений

М4. Плоский двойной маятник

Смоделировать движение плоского двойного маятника в поле силы тяжести. Найти нормальные моды малых колебаний (их формы и частоты). Провести Фурье-анализ движения системы (в том числе найти частоты нормальных колебаний таким способом). Проверить законы сохранения энергии и момента импульса (последнее при “выключенной” силе тяжести).

М9. Движение со связями - 1

Смоделировать движение материальной точки по поверхности полусферы, лежащей на горизонтальной плоскости, под действием силы тяжести и силы трения. Определить момент отрыва точки от сферы. Проверить закон сохранения энергии (учтя работу силы трения).

М10. Движение со связями - 2

Смоделировать движение двойного маятника без трения в поле силы тяжести. Проверить закон сохранения энергии и момента импульса.

Э3. Расчет магнитостатических полей-1

Смоделировать магнитостатическое поле (построить векторное поле и его силовые линии в плоских сечениях) следующих систем: 1) круговое замкнутое кольцо с током; 2) прямоугольный замкнутый контур с током; 3) два прямых параллельных провода с током (рассмотреть случаи однонаправленных и разнонаправленных токов) 4) магнитный диполь (модель магнитного поля Земли); 5) катушка с током (соленоид) конечных размеров.

Э4. Расчет магнитостатических полей-2

Смоделировать магнитостатическое поле (построить векторное поле и его силовые линии в плоских сечениях) следующих систем: 1) однородно намагниченный прямоугольный параллелепипед; 2) однородно намагниченный шар; 3) коаксиальный кабель с постоянным током (плотность тока по сечению кабеля считать постоянной).

ФТТ1. Излучение абсолютно черного тела.

Построить график спектральной плотности излучения абсолютно черного тела (формула Планка). Сделать анимацию изменения графика при изменении температуры тела. Прямой оптимизацией (поиском максимума) продемонстрировать закон смещения Вина. Интегрированием по длинам волн получить закон Стефана-Больцмана. Подгонкой температуры тела аппроксимировать экспериментально полученный солнечный спектр.

ФТТ2. Различные модели теплоемкости твердого тела

При помощи моделей теплоемкости твердого тела Эйнштейна и Дебая описать экспериментальные данные по теплоемкости серебра. Для этого определить температуры Эйнштейна и Дебая подгонкой формул под экспериментальные данные.

ФТТЗ. Идеальный одномерный кристалл

Найти разрешенные уровни энергии и закон дисперсии электрона в потенциале одномерной “дираковской гребенки” (модель идеального одномерного кристалла). Сделать анимацию эволюции закона дисперсии при изменении эффективной массы электрона и расстояния между атомами.

Вопросы к экзамену

1. Решение алгебраических уравнений и систем.
2. Решение дифференциальных уравнений и их систем.
3. Моделирование процессов, связанных с неравновесными носителями заряда в полупроводниках.
4. Решение уравнений теплопроводности и диффузии.
5. Диффузионно-дрейфовая модель физики полупроводников.
6. Моделирование контактных явлений в полупроводниках.
7. Контакт металл-полупроводник. Электронно-дырочный переход.
8. Стационарные задачи для уравнений в частных производных. Граничные условия.
9. Нестационарные задачи для уравнений в частных производных. Начальные условия.
10. Задачи на собственные значения для уравнений в частных производных.
11. История возникновения теории вероятностей и метода Монте Карло (МК).
12. Задача об игле Бюффона.
13. Основные типы задач, решаемые методом МК. Принципиальная схема алгоритмов методов МК.
14. Генерация псевдослучайных чисел для методов МК. История и современные подходы.
15. Генераторы с равномерным распределением, связь с общей проблемой хаоса в динамических системах.
16. Тестирование качества генераторов случайных чисел: проверка качества распределения, проверка корреляций.
17. Генерация случайных чисел с неравномерным распределением: метод инверсии.
18. Генерация случайных чисел с неравномерным распределением: метод отбора.
19. Генерация случайных чисел с неравномерным распределением: обобщение метода отбора.
20. Генерация случайных чисел с неравномерным распределением: метод суперпозиции.
21. Генерация случайных чисел с экспоненциальным распределением.
22. Генерация случайных чисел с гауссовым распределением.
23. Генерация случайных векторов в двумерном и трехмерном пространствах.
24. Генерация случайных чисел для многомерных распределений.
25. Генерация случайных чисел с коррелированным гауссовым распределением.
26. Центральная предельная теорема.
27. Оценка погрешности метода МК.
28. Скорость сходимости метода МК и возможность ее ускорения.
29. Интегрирование функций с помощью метода МК. Выбор оптимальной плотности распределения случайных чисел. Сравнение скорости сходимости метода МК с сеточными методами (на примере метода трапеции).
30. Применение метода МК для моделирования диффузионных процессов на примере расчета средней скорости и коэффициента диффузии для одномерного случайного блуждания.
31. Применение метода МК к физическим задачам: схема расчета среднего времени прохождения частицы через случайную среду.
32. Применение метода МК к задачам моделирования структуры материалов.

Экзаменационный билет

1. Решение уравнений теплопроводности и диффузии.
2. Генерация случайных векторов в двумерном и трехмерном пространствах.

v. РЕСУРСЫ

V.1 Основная литература

1. *Г.А. Михайлов* Статистическое моделирование. Методы Монте - Карло // Юрайт, 2018.
2. *И.М. Соболев* Метод Монте-Карло // Наука, 1985.

V.2 Дополнительная литература

1. *Гулд Х., Тобочник Я.* Компьютерное моделирование в физике. Ч. 2. М.: Мир. 1990 – 400 с.
2. *Кириянов Д.В., Кириянова Е.Н.* Вычислительная физика. М.: Полибук Мультимедиа, 2006 – 352 с.
3. *Дьяконов В.П., Абраменкова И.В.* MathCAD-7.0 в математике, физике и в Internet. М.: Изд-во Нолидж. 1998 – 352 с.
4. *Гандер В., Гржебичек И.* Решение задач в научных вычислениях с применением Maple и MATLAB. Изд-во "Вассамедина". 2005 – 520 с.

V.3 Программное обеспечение

№п/п	Наименование	Условия доступа/скачивания
1.	Пакет MathCAD	Из внутренней сети университета (договор)
2.	Пакет MATLAB	Из внутренней сети университета (договор)

V.4 Профессиональные базы данных, информационные справочные системы, интернет-ресурсы (электронные образовательные ресурсы)

Не требуется

V.5 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Лекции и практические занятия проходят в аудитории, оборудованной компьютерным проектором.

Учебные аудитории для лекционных занятий по дисциплине обеспечивают использование и демонстрацию тематических иллюстраций, соответствующих программе дисциплины в составе: мультимедийный проектор с дистанционным управлением.

Практические занятия проходят в компьютерных классах. Учебные аудитории для самостоятельных занятий по дисциплине оснащены с возможностью подключения к сети Интернет и доступом к электронной информационно-образовательной среде НИУ ВШЭ.

VI. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ И ИНВАЛИДОВ

В случае необходимости, обучающимся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (по заявлению обучающегося), а для инвалидов также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида, могут предлагаться следующие варианты восприятия учебной информации с учетом их индивидуальных психофизических особенностей, в том числе с применением электронного обучения и дистанционных технологий:

i. *для лиц с нарушениями зрения:* в печатной форме увеличенным шрифтом; в форме электронного документа; в форме аудиофайла (перевод учебных материалов в аудиоформат); в печатной форме на языке Брайля; индивидуальные консультации с привлечением тифлосурдопереводчика; индивидуальные задания и консультации.

ii. *для лиц с нарушениями слуха:* в печатной форме; в форме электронного документа; видеоматериалы с субтитрами; индивидуальные консультации с привлечением сурдопереводчика; индивидуальные задания и консультации.

iii. *для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:* в печатной форме; в форме электронного документа; в форме аудиофайла; индивидуальные задания и консультации.