



# СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ "СВ. КЛИМЕНТ ОХРИДСКИ"

## ФИЗИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

Утвърдена с Протокол на ФС N: ...../ .....

Декан:

/доц. д-р Д. Мърваков/

## УЧЕБНА ПРОГРАМА

**ПО ДИСЦИПЛИНАТА:** Компютърни методи за системи с много частици

**ВКЛЮЧЕНА В УЧЕБНИЯ ПЛАН НА СПЕЦИАЛНОСТ:** физика, инженерна физика

**СТЕПЕН НА ОБУЧЕНИЕ:** бакалавър

**КАТЕДРА:** Физика на твърдото тяло и микроелектроника

### ИЗВАДКИ ОТ УЧЕБНИЯ ПЛАН

Вид на занятията:	Семестър:	Хорариум-часа/ седмично:	Хорариум-часа Общо:
Лекции	8	3	45
Семинарни упражнения	8		
Практически упражнения		2	30
Общо часа:		5	75
Форма на контрол:		Текуща оценка	

## **А. АНОТАЦИЯ**

Курсът запознава студентите с основите на компютърното симулиране. Основният въпрос, на който той се стреми да отговори е: как да се определи колективното поведение на една многочастична система като познаваме силите действащи на отделните частици. За тази цел се разглеждат два метода: Монте Карло или стохастичен метод и метод на молекулярната динамика или детерминистичен метод. Приложенията са групирани в две области: поведение на твърди тела и флуиди (между тях класическите модел на Изинг и модел на меки сфери) и движение на частици (фонони, електрони, йони) в разсейващи среди.

Курсът е подходящ за студенти интересувани се от областите: физика на твърдото тяло, полупроводници, оптика, теоретична физика и числени методи. Той е изграден условно на три нива: теория, алгоритми и компютърни програми. Последните се реализират на упражненията към курса и в самостоятелна работа. От студентите се изисква познания по статистическа физика в рамките на университетския курс. Знаенето поне на един език за програмиране е основно изискване. В рамките на курса обаче знанията по програмиране се опресняват и задълбочават.

Успешно завършилите студенти ще могат: да правят прости програми за поведението на многочастични системи с Монте Карло методи и методи на молекулярната динамика ; да разчитат и анализират програми за компютърно моделиране с достъпен код; да използват получените при пресмятанията резултати за получаване на статични и динамични свойства на твърди тела и флуиди и за статистическото поведение на частици в разсейващи среди

## **Б. СЪДЪРЖАНИЕ НА УЧЕБНАТА ПРОГРАМА:**

№	Тема -лекции	часа
	<b>Основни понятия от теория на вероятностите и статистическата физика</b>	<b>8</b>
1	Основни понятия от теория на вероятностите. Функция на разпределение и плътност на разпределение на случайна величина	1
2	Генератори на псевдослучайни числа с равномерно разпределение. Тестове за независимост на случайни числа	1

3	Методи за генериране на случайни числа със зададено разпределение: трансформационен метод, метод на фон Нойман. Метод за генериране на случайни числа с Гаусово разпределение	1
4	Метод на Метрополис – importance sampling	1
5	Основна хипотеза в статистическата физика. Вероятност и средни стойности. Степен на израждане и статистическа сума. Ентропия	2
6	Основни статистически ансамбли. Средни величини по време и по ансамбъл. Ергодичност.	2
	<b>Основни методи за симулиране на свойствата на системи с много частици</b>	<b>(10 ч)</b>
7	Същност и приложения на компютърните симулации. Обща структура на една програма за компютърни симулации. Използване и интерпретация на данните от компютърните симулации	1
8	Симулиране на свойствата на статистически системи използвайки неголям брой частици. Елементарна клетка. Гранични условия и критерий за най-близък образ. Ограничения налагани от периодичността на системата.	1
9	Монте Карло (МК) метод за числено интегриране на едномерни и многомерни интеграли	1
10	Алгоритъмът на Метрополис – основа на приложението на МК методите за различни статистически ансамбли.	2
11	Числено решаване на уравненията на движение – същност на молекулярната динамика (МД). Преход от механична към термодинамична система.	1
12	Специфични методи за числено решаване на диференциални уравнения в МД. Метод на Верле и подобни. Предикторно - коректорни методи. Оценка на точността и стабилността на пресмятията в МД.	2
13	Анализ на резултатите от пресмятията– статични и динамични свойства на термодинамичните системи	2
	<b>Приложение на МК и МД методи за различни статистически ансамбли</b>	<b>(18 ч)</b>
14	Моделни потенциали за двучастично взаимодействие – потенциал на Ленард-Джонс, Кулоново взаимодействие, хармоничен осцилатор, потенциал на Морз.	2
15	Тричастични потенциали в твърди тела. Отчитане на ъгловата зависимост на взаимодействие между частиците	2
16	Симулиране на разпределението по енергии на микроканоничен ансамбъл от невзаимодействащи частици.	2

17	Симулиране на движение на частици под действие на потенциала на Ленард-Джонс. Списък на Верле. Приведени единици. Радиална функция на разпределение на двумерен газ.	3
18	Модел на Изинг. Фазов преход в магнитна система. Изменение на намагнитеността, топлоемността, магнитната възприемчивост и енергията на системата при фазов преход от втори род.	3
19	Корелационно време. Критично забавяне и методи за ускоряване на МК пресмятанията – хистограмни и кластерни методи	2
20	Моделиране на топлопроводност на твърди тела	2
21	Моделиране на израстване на тънки слоеве	2
	<b>Движение на частици в среди с разсейване</b>	<b>10</b>
22	Движение на фотони в дифузни среди. Моделиране на процесите на разсейване и поглъщане на фотони. Разпространение на светлината в биологични тъкани. Компютърна томография	4
23	Транспортно уравнение на Болцман. Структура на МК програма за моделиране на пренос на заряд в полупроводници. Модели на зонна структура използвани в МК програмите	2
24	Механизми на разсейване и вероятност за разсейване в ковалентни полупроводници. Динамика на движение на електрони. Определяне на коефициентите на дифузия	2
25	Взаимодействие на заредени частици с твърди тела. Моделиране на процесите на йонна имплантация и на разпрашване на твърди тела	2
	<b>Компютърни упражнения</b>	
1	1. Генериране на поредици от случайни числа с метода на трансформациите и с метода на фон Нойман. Проверка на разпределенията чрез съпоставяне на хистограмите с теоретичната крива.	6
2	Намиране на разпределението по енергии на частиците на идеален газ – микроканоничен ансамбъл.	6
3	Двумерен модел на Изинг. Числено пресмятане на корелационното време. Намиране на енергията, магнитния момент, възприемчивостта и топлинния капацитет.	8
4	Израстване на тънки слоеве при дифузионно ограничени реакции.	8
5	Двумерен модел на меки сфери – намиране на радиалната функция на разпределение и средното квадратично отклонение на частиците за определяне фазата на системата.	8
6	Разсейване на електрони от два възможни механизма.	4

7	Симулиране движението на фотони в дифузна среда.	6
---	--	---

Забележка: Часовете за упражнения са повече от 30 защото студентите ще избират измежду предложените упражнения

В. Формата на контрол е: текуща оценка

Оценката се формира 60% от проекти и 40% от тестове. Предвижда се три теста – след всеки един от основните раздели. Проектите се основават на задачи описани по-горе. Предвижда се всеки студент да разработи четири проекта и да ги предаде и дискутира с преподавателя в указани срокове.

Г. Основна литература:

1. J. Haile, Molecular Dynamics Simulations, Wiley (1992)
2. M. Allen, D. Tildesley, Computer Simulations in Liquids (1997)
3. С. Кунин Вычислительная физика, Мир (1992)
4. А. Реклайтис, Р. Мицкявичус, Метод Монте Карло в физике полупроводников, Серия Математика и Кибернетика, 10 (1988)
5. В. Тучин, Исследование биотканей методом светорассеянием, Успехи физических наук, 167 pp. 517-539 (1997)

Д. Допълнителна литература:

1. Simulations of Liquids and Solids – Ed. G. Ciccoti, D. Frenkel, I. McDonald, Elsevier (1990) – колекция от най-важните статии по МК и МД методи до годината на издаването.
2. J. Thijssen, Computational Physics, Cambridge University Press (1999) – числени методи с физични приложения на високо ниво
3. W. Williamson, G. Duncan, Monte Carlo simulation of nonrelativistic electron scattering. Am. J. Phys. 54 262 (1986)

Съставил програмата:

Дата: 15.04.2004.

/доц. Цветан Велинов./