

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
физики твердого тела и наноструктур
(Середин П.В.)

31.08.2022

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.06 Моделирование и проектирование наносистем

1. Код и наименование направления подготовки:

03.04.02 Физика

2. Профиль подготовки:

Физика наносистем

3. Квалификация (степень) выпускника: Магистр

4. Форма обучения: Очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: Кафедра физики твердого тела и наноструктур

6. Составители программы: Дубровский О.И., кандидат физ.-мат наук, доцент

7. Рекомендована:

НМС Физического факультета ВГУ протокол № 6 от 14.06.2022 г.

8. Учебный год: 2023/2024

Семестр(ы): 3

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Целью преподавания дисциплины является подготовка студентов для решения научно-исследовательских задач нанофизики с помощью компьютерного моделирования.

Задачи учебной дисциплины:

- ознакомление студентов с физическими принципами, лежащими в основе моделирования электронной структуры материалов на наноуровне,
- формирование у студентов знаний об основных методах моделирования в нанофизике,
- формирование умения проводить вычислительный эксперимент в данной предметной области, используя при этом современные программные среды для моделирования электронной структуры наносистем.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: Дисциплина «Моделирование наносистем» относится к дисциплинам вариативной части блока Б1.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-5	способность использовать свободное владение профессионально-профилированными знаниями в области компьютерных технологий для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами направленности (профиля) подготовки	знать: - особенности основных моделей и алгоритмов, используемых в вычислительной нанофизике. уметь: выбирать оптимальные методы расчета физико-химических свойств наноструктур. владеть: - навыками использования основных методов расчета свойств наносистем.
ПК-2	способность свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности	знать: - основные положения методов квантовой механики, используемых при исследовании наносистем. выбирать оптимальные методы расчета физико-химических свойств наноструктур. владеть: - навыками использования основных методов расчета свойств наносистем.
ПК-3	способность принимать участие в разработке новых методов и методических подходов в научно-инновационных исследованиях и инженерно-технологической деятельности	знать: - особенности основных моделей и алгоритмов, используемых в вычислительной нанофизике. уметь: выбирать оптимальные методы расчета физико-химических свойств наноструктур. владеть: - навыками использования основных методов расчета свойств наносистем

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. - 2/72.

Форма промежуточной аттестации: зачет

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		3 семестр		
Аудиторные занятия	26	26		
в том числе: лекции	26	26		
практические				
лабораторные				
Самостоятельная работа	46	46		
Форма промежуточной аттестации	зачет	зачет		
Итого:	72	72		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	Математическое моделирование и вычислительный эксперимент.	Место вычислительного эксперимента в физике наносистем. Этапы вычислительного эксперимента и их краткая характеристика. Общие рекомендации для построения эффективных алгоритмов.
1.2	Уравнение Шредингера для систем многих частиц.	Приближенные формы уравнения Шредингера для молекул, твердых тел и наносистем. Адиабатическая теория и приближение Борна-Оппенгеймера, критерии применимости. Приближение Хартри и Хартри-Фока.
1.3	Теория функционала плотности	Уравнения Кона-Шэма. Аппроксимация локальной плотности. Численное решение уравнений функционала плотности. Электроны в периодическом потенциале. Вариационный метод Ритца. Построение кристаллических потенциалов. Метод присоединенных плоских волн и его практические аспекты. Линеаризация методов зонной теории.
1.4	Моделирование электронного строения нанопленок и нанослоев	Метод линеаризованных присоединенных плоских волн для пленок. Построение пленочного потенциала. Методика вычисления спектральных характеристик. Компьютерное моделирование электронной структуры нанопленок.
1.5	Моделирование электронного строения нанотрубок и нанонитей	Электронная структура нанотрубок в приближении слабой связи. Метод линеаризованных присоединенных цилиндрических волн. Компьютерное моделирование электронной структуры нанотрубок.

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				Всего
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	
1.1	Математическое моделирование и вычислительный эксперимент.	2			4	
1.2	Уравнение Шредингера для систем многих частиц.	6			12	
1.3	Теория функционала плотности	6			10	
1.4	Моделирование электронного строения нанопленок и нанослоев	6			10	
1.5	Моделирование электронного строения нанотрубок и нанонитей	6			10	
	Итого:	26	0	0	46	72

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Изучение дисциплины «Моделирование наносистем» предусматривает осуществление учебной деятельности состоящей из двух частей: обучения студентов преподавателем и самостоятельной учебной деятельности студентов по изучению дисциплины.

Дисциплина «Моделирование наносистем» реализуется с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий.

Основной, наиболее экономичной формой получения и усвоения информации, теоретических знаний в вузе является лекция, позволяющая воспринять значительную сумму основных знаний и потому способствующая повышению продуктивности всех других форм учебного труда. Подготовка к лекциям является одним из видов самостоятельной работы студентов. Студентам, чтобы хорошо овладеть учебным материалом, необходимо выработать навыки правильной и планомерной работы. Перед началом лекционных занятий надо просмотреть все, что было сделано в предыдущий раз. Это позволит сосредоточить внимание и восстановить в памяти уже имеющиеся знания по данному предмету. Кроме того, такой метод поможет лучше запомнить как старое, так и новое, углубит понимание того и другого, так как при этом устанавливаются связи нового со старым, что является не только обязательным, но и основным условием глубокого овладения материалом. Чем детальнее изучаемое ассоциируется с известным ранее, тем прочнее сохраняется в памяти.

Приступая к изучению нового материала, необходимо сосредоточиться, т.е. сконцентрировать внимание и не отвлекаться от выполняемой работы, помня, что желание запомнить является гарантией успешной работы, отсутствие же воли к запоминанию снижает эффект восприятия.

Записывать на лекции необходимо главное, не стремясь зафиксировать все слово в слово. Выбрать же главное без понимания предмета невозможно. Наличие собственного конспекта лекций позволяет еще раз ознакомиться, продумать, разобраться в новом материале, так как недостаточно хорошо понятые во время лекции положения могут быть восстановлены в памяти, сопоставлены с другими, додуманы, дополнены, уяснены и расширены с помощью учебной литературы. Записи являются пособиями для повторения, дают возможность охватить содержание лекции и всего курса в целом.

При этом хорошо овладеть содержанием лекции - это:

- знать тему;
- понимать значение и важность ее в данном курсе;
- четко представлять план;
- уметь выделить основное, главное;
- усвоить значение примеров и иллюстраций;
- связать вновь полученные сведения о предмете или явлении с уже имеющимися;
- представлять возможность и необходимость применения полученных сведений.

Существует несколько общих правил работы на лекции:

- к прослушиванию лекций следует готовиться, что позволит в процессе лекции отделить главное от второстепенного;
- лекции необходимо записывать с самого начала, так как оно часто бывает ключом ко всей теме;
- так как дословно записать лекцию невозможно, то необходимо в конспекте отражать: формулы, определения, схемы, трудные места, мысли, примеры, факты и положения от которых зависит понимание главного, новое и незнакомое, неопубликованные данные, материал отсутствующий в учебниках и т.п.;
- записывать надо сжато;
- во время лекции важно непрерывно сохранять рабочую установку, умственную активность.

Самостоятельная работа студентов наряду с аудиторной представляет одну из форм учебного процесса и является существенной ее частью, что наиболее ярко пред-

ставлено в процессе подготовки магистров. Последнее обусловлено тем, что самостоятельная работа предназначена для формирования навыков самостоятельной работы как вообще, так и в учебной, научной деятельности, формирование и развитие способности принимать на себя ответственность, самостоятельно решать проблему, находить конструктивные решения, выход из кризисной ситуации и т.д.

Самостоятельная работа формирует самостоятельность не только как совокупность умений и навыков, но и как черту характера, играющую существенную роль в структуре личности современного специалиста высшей квалификации. Она воспитывает самостоятельность как черту характера. Никакие знания, полученные на уровне пассивного восприятия, не ставшие объектом собственной умственной или практической работы, не могут считаться подлинным достоянием человека.

Давая возможность расширять и обогащать знания, умения по индивидуальным направлениям, самостоятельная работа студента позволяет создать разносторонних специалистов. В процессе самостоятельной работы развивают творческие возможности обучающегося, при этом самостоятельная работа завершает задачи всех видов учебной работы.

Самостоятельная работа - это планируемая работа студентов, выполняемая по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Преподаватель, ведущий занятия, организует, направляет самостоятельную работу студентов и оказывает им необходимую помощь. Однако самостоятельность студентов должна превышать объем работы, контролируемой преподавателем работы, и иметь в своей основе индивидуальную мотивацию обучающегося по получению знаний, необходимых и достаточных для будущей профессиональной деятельности в избранной сфере. Преподаватель при необходимости может оказывать содействие в выработке и коррекции данной мотивации, лежащей в основе построения самостоятельной деятельности студента по изучению дисциплины, получению необходимых знаний и навыков.

Результат обучения и самостоятельной работы студента предполагает наличие следующих составляющих:

- понимание методологических основ построения изучаемых знаний;
- выделение главных структур учебного курса;
- формирование средств выражения в данной области;
- построение методик решения задач и ориентации в проблемах (ситуациях).

Самостоятельная работа студента-магистра при изучении дисциплины «Моделирование наносистем» включает в себя:

- | | |
|------------------------------------|------------|
| изучение теоретической части курса | - 38 часов |
| подготовку к зачету | - 8 часов |

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Ибрагимов И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем. / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. - СПб.: Изд-во "Лань", 2010. - 384 с. // Издательство «Лань» : электронно-библиотечная система. - URL : http://e.lanbook.com
2.	Дегтяренко Н.Н. Специальные разделы квантово-механических методов расчетов свойств кластеров и наноматериалов / Н.Н. Дегтяренко. - М.: МИФИ, 2008. - 156 с. // Электронно-библиотечная система. - URL : http://biblioclub.ru
3.	Соловьев М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. - М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2005. - 536 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4.	Дегтяренко Н.Н. Описание программных пакетов для квантовых расчетов наносистем / Н.Н. Дегтяренко. - М.: МИФИ, 2008. - 180 с.
5.	Власов А.И. Основы моделирования микро- и наносистем / А.И. Власов, А.В. Назаров. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. - 144 с.

6.	Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. / Дж. Слэтер. - М.: Мир, 1978. - 658 с.
7.	Пискунов В.Н. Фуллерены и нанотрубки. Основные свойства и методы расчета / В.Н. Пискунов, И.А. Давыдов, К.Б. Жогова. - Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2005, - 92 с.
8.	Электронная структура конденсированных сред / Кацнельсон А.А. [и др.]. - М.: Изд-во МГУ, 1990. - 237 с.
9.	Курганский С.И. Электронная структура тонких пленок сложных металлооксидов [Текст]: дис. докт. физ.-мат. наук / С.И. Курганский ; Воронежский гос. ун-т. - Воронеж, 1996. - 261 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник
10.	http://www.lib.vsu.ru - Зональная научная библиотека ВГУ
11.	http://www.moodle.vsu.ru - Образовательный портал электронного университета ВГУ.
12.	https://lanbook.com - ЭБС «Лань»
13.	https://biblioclub.ru - ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
14.	https://edu.vsu.ru □ Образовательный портал "Электронный университет ВГУ"

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1.	Манякин, М.Д. Программный пакет Wien2K. Часть 1. Моделирование электронной структуры кристаллов. Зонная структура и плотность состояний: учебно-методическое пособие / М.Д. Манякин, О.И. Дубровский, Е.Р. Лихачев, С.И. Курганский // Воронежский государственный университет. - Воронеж. - 2015- 48 с. - URL : http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m15-265.pdf
2.	Манякин, М.Д. Программный пакет Wien2K. Часть 2. Моделирование рентгеновских эмиссионных и абсорбционных спектров: учебно-методическое пособие / М.Д. Манякин, О.И. Дубровский, Е.Р. Лихачев, С.И. Курганский // Воронежский государственный университет. - Воронеж. - 2017- 31 с. - URL : http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m17-154.pdf
3.	Курганский, С.И. Методы зонной теории. Часть 1. Методические указания по курсу «Вычислительные методы в теории твердого тела» / С.И. Курганский, Н.С. Переславцева, О.И. Дубровский. - Воронежский государственный университет. - Воронеж. - 2006. - 20 с. - URL : http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/sep06011.pdf

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

При реализации дисциплины используются активные и интерактивные методы и технологии профессионального обучения.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Лаборатория компьютерных технологий, САПР и математического моделирования кафедры физики твердого тела и наноструктур. Для проведения лабораторных работ необходим компьютерный класс с лицензионным программным обеспечением.

Реализация дисциплины с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий осуществляется через образовательный портал "Электронный университет ВГУ".

19. Фонд оценочных средств:

19.1 Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наиме-	ФОС* (средства оценивания)

		нование)	
ПК-2	знать: - основные положения методов квантовой механики, использующихся при исследовании наносистем.	Уравнение Шредингера для систем многих частиц.	Устный опрос
	уметь: выбирать оптимальные методы расчета физико-химических свойств наноструктур.	Теория функционала плотности	Устный опрос
	владеть: - навыками использования основных методов расчета свойств наносистем.	Моделирование электронного строения нанопленок и нанослоев	Устный опрос
ПК-3	знать: - особенности основных моделей и алгоритмов, используемых в вычислительной нанозифике.	Математическое моделирование и вычислительный эксперимент.	Устный опрос
	уметь: выбирать оптимальные методы расчета физико-химических свойств наноструктур.	Теория функционала плотности	Устный опрос
	владеть: - навыками использования основных методов расчета свойств наносистем.	Моделирование электронного строения нанотрубок и нанонитей	Устный опрос
ОПК-5	знать: - особенности основных моделей и алгоритмов, используемых в вычислительной нанозифике.	Математическое моделирование и вычислительный эксперимент.	Устный опрос
	уметь: выбирать оптимальные методы расчета физико-химических свойств наноструктур.	Теория функционала плотности	Устный опрос
	владеть: - навыками использования основных методов расчета свойств наносистем.	Моделирование электронного строения нанопленок и нанослоев	Устный опрос
Промежуточная аттестация			Комплект КИМ

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине - зачет. В приложение к диплому вносится отметка *зачтено*.

Оценка уровня освоения дисциплины «Моделирование наносистем» осуществляется по следующим показателям:

- полнота ответов на вопросы контрольно-измерительного материала;
- полнота ответов на дополнительные вопросы.

Критерии оценки освоения дисциплины «Моделирование наносистем»:

- отметка *зачтено* выставляется в случае, когда работа студента соответствует высокому уровню сформированности компетенций: компетенции сформированы полностью, проявляются и используются систематически, в полном объеме или повышенному уровню сформированности компетенций: компетенции в целом сформированы, но проявляются и используются фрагментарно, не в полном объеме или пороговому (базовому) уровню сформированности компетенций: компетенции сформированы в общих чертах, проявляются и используются ситуативно, частично.
- отметка *не зачтено* выставляется в случае несоответствия работы студента всем показателям, его неорганизованности, безответственности и низкого качества работы.

19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Перечень вопросов к зачету (КИМ):

1. Место вычислительного эксперимента в физике наносистем. Этапы вычислительного эксперимента и их краткая характеристика.
2. Общие рекомендации для построения эффективных алгоритмов.
3. Приближенные формы уравнения Шредингера для молекул, твердых тел и наносистем.
4. Адиабатическая теория и приближение Борна-Оппенгеймера, критерии применимости.
5. Приближение Хартри и Хартри-Фока.
6. Уравнения Кона-Шэма. Аппроксимация локальной плотности.
7. Численное решение уравнений функционала плотности.
8. Электроны в периодическом потенциале.
9. Вариационный метод Ритца.
10. Линеаризация методов зонной теории.
11. Построение кристаллических потенциалов.
12. Метод присоединенных плоских волн и его практические аспекты.
13. Методика вычисления спектральных характеристик.
14. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн для пленок.
15. Компьютерное моделирование электронной структуры нанопленок.
16. Электронная структура нанотрубок в приближении слабой связи.
17. Метод линеаризованных присоединенных цилиндрических волн.
18. Компьютерное моделирование электронной структуры нанотрубок.

19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме устного опроса. Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний.

При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.