

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Ястребов Олег Александрович  
Должность: Ректор  
«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»

Дата подписания: 27.05.2024 15:52:32

Уникальный программный ключ:

ca953a0120d891083f939673078ef1a989dae18a  
(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

## Инженерная академия

# РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

## МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОУСТРОЙСТВ

(наименование дисциплины/модуля)

**Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:**

## 28.03.02 НАНОИНЖЕНЕРИЯ

(код и наименование направления подготовки/специальности)

**Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):**

## НАНОТЕХНОЛОГИИ И НАНОМАТЕРИАЛЫ В ПРИБОРОСТРОЕНИИ

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2024 г.

## **1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

Дисциплина «Modelling of Nanodevices» входит в программу бакалавриата «Нанотехнологии и наноматериалы в приборостроении» по направлению 28.03.02 «Наноинженерия» и изучается в 6 семестре 3 курса. Дисциплину реализует Базовая кафедра «Нанотехнологии и микросистемная техника». Дисциплина состоит из 4 разделов и 29 тем и направлена на изучение основ моделирования в области нанотехнологий

Целью освоения дисциплины является знакомство студентов с основами моделирования наноустройств, включая методы теории функционала плотности (DFT)

## **2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

Освоение дисциплины «Моделирование наноустройств» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

*Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)*

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
ПК-2	Способен осуществлять моделирование принципиальных схем микроэлектромеханической системы и цифровых схем управления	ПК-2.1 Знает программное обеспечение для моделирования принципиальных схем микроэлектромеханической системы и цифровых схем управления; ПК-2.2 Умеет выполнять моделирование принципиальных схем микроэлектромеханической системы и цифровых схем управления;
ПК-8	Способен осуществлять подготовку технических решений по оптимизации технологического процесса изготовления микро- и наноразмерных электромеханических систем	ПК-8.1 Знает типовые технические решения по оптимизации технологического процесса изготовления микро- и наноразмерных электромеханических систем; ПК-8.2 Умеет осуществлять подготовку технических решений по оптимизации технологического процесса изготовления микро- и наноразмерных электромеханических систем;

## **3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО**

Дисциплина «Моделирование наноустройств» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Моделирование наноустройств».

*Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины*

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
ПК-2	Способен осуществлять моделирование принципиальных схем микроэлектромеханической системы и цифровых схем управления	Научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской работы); Моделирование полупроводниковых	Научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской работы); Технологическая практика; Преддипломная практика;

<b>Шифр</b>	<b>Наименование компетенции</b>	<b>Предшествующие дисциплины/модули, практики*</b>	<b>Последующие дисциплины/модули, практики*</b>
		nanoструктур для информационных систем;	
ПК-8	Способен осуществлять подготовку технических решений по оптимизации технологического процесса изготовления микро- и наноразмерных электромеханических систем	Научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской работы); Теоретическая механика;	Научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской работы); Технологическая практика; Преддипломная практика;

\* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

\*\* - элективные дисциплины /практики

#### **4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ**

Общая трудоемкость дисциплины «Modelling of Nanodevices» составляет «4» зачетные единицы.

*Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.*

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)	
		6	
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	72	72	
Лекции (ЛК)	36	36	
Лабораторные работы (ЛР)	36	36	
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0	0	
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	45	45	
Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.	27	27	
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	<b>ак.ч.</b>	<b>144</b>	<b>144</b>
	<b>зач.ед.</b>	<b>4</b>	<b>4</b>

Общая трудоемкость дисциплины «Modelling of Nanodevices» составляет «4» зачетные единицы.

*Таблица 4.2. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для заочной формы обучения.*

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)	
		6	
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	12	12	
Лекции (ЛК)	6	6	
Лабораторные работы (ЛР)	6	6	
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0	0	
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	123	123	
Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.	9	9	
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	<b>ак.ч.</b>	<b>144</b>	<b>144</b>
	<b>зач.ед.</b>	<b>4</b>	<b>4</b>

## 5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

*Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы*

<b>Номер раздела</b>	<b>Наименование раздела дисциплины</b>	<b>Содержание раздела (темы)</b>		<b>Вид учебной работы*</b>
Раздел 1	Density functional method (DFT)	1.1	Density functional method	ЛК
		1.2	The Van Vleck catastrophe: the nature of the "exponential well"	ЛК
		1.3	Method Thomas-Fermi: an example of the density functional	ЛК
		1.4	Kohn-Hohenberg theorems	ЛК
		1.5	Mermin Theory	ЛК
		1.6	Kohn-Shame ansatz equation	ЛК
		1.7	Variational Kohn-Hohenberg principle	ЛК
		1.8	The equation Kona-Sham	ЛК
		1.9	Local Density Approximation (LDA)	ЛК
		1.10	Formalism of Kona-Shem	ЛК
		1.11	Exchange-correlation energy	ЛК
		1.12	Method for solving the Kohn-Sham equation	ЛК
		1.13	Temporary effects in the functional method density (TDDFT)	ЛК
		1.14	Frenkel's variational principle	ЛК
		1.15	Density functional for non-stationary systems	ЛК
		1.16	Spin density functional	ЛК
		1.17	Density functional in the theory of superconductivity, quantum molecular dynamics	ЛК
		1.18	Comparison of Hartree-Fock and Kohn-Sham methods	ЛК
		1.19	Exchange-correlation functionals	ЛК
		1.20	Methods of gradient correction. Hybrid methods	ЛК
		1.21	Computational features of DFT methods	ЛК
		1.22	Calculation quality density functional methods	ЛК
Раздел 2	Practical lesson of the devices modelling	2.1	Calculations of atoms and simple molecules	ЛР
Раздел 3	Software for quantum chemical calculations	3.1	GAMESS, Gaussian, HyperChem, PRIRODA, WINMOPAC programs, Dalton and NWChem software packages	ЛК
		3.2	Interpreter programs for the results of quantum chemical calculations: ChemCraft, ViewMol3D, Molekel, Molden, GaussView	ЛК
		3.3	Program operation algorithms: methods, bases, functionals, properties, calculation parameters, areas of application	ЛК
Раздел 4	Practical lesson of the devices modelling	4.1	Calculations of 3D structures	ЛР
		4.2	Surface calculations	ЛР
		4.3	Individual tasks of choice	ЛР

\* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – практические/семинарские занятия.

## 6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

*Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины*

<b>Тип аудитории</b>	<b>Оснащение аудитории</b>	<b>Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)</b>
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	
Для самостоятельной работы	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	

\* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО!**

## 7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Основная литература:

1. Демьянов, Александр, Николай Евсеев, and Олег Динариев. Основы метода функционала плотности в гидродинамике. Litres, 2022
2. Zhu, Chaoyuan, ed. Time-Dependent Density Functional Theory: Nonadiabatic Molecular Dynamics. CRC Press, 2022

### Дополнительная литература:

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие - Санкт-Петербург: Лань, 2019. - 428 с.
2. Chen, Jianhua, Zhenghe Xu, and Ye Chen. "Electronic structure and surfaces of sulfide minerals." Density functional theory and applications (2020): 181-236

### Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров
  - Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН  
<http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>
    - ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>
    - ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>
    - ЭБС «Консультант студента» [www.studentlibrary.ru](http://www.studentlibrary.ru)
    - ЭБС «Троицкий мост»
2. Базы данных и поисковые системы
  - электронный фонд правовой и нормативно-технической документации  
<http://docs.cntd.ru/>
    - поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>
    - поисковая система Google <https://www.google.ru/>
    - реферативная база данных SCOPUS

<http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

*Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля\*:*

1. Курс лекций по дисциплине «Моделирование наноустройств».

\* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

## **8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система\* оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Моделирование наноустройств» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе дисциплины.

\* - ОМ и БРС формируются на основании требований соответствующего локального нормативного акта РУДН.

**РАЗРАБОТЧИК:**

Доцент

*Должность, БУП*

Карцев Алексей Иванович

*Фамилия И.О.*

**РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:**

Заведующий кафедрой

*Должность БУП*

Попов Сергей Викторович

*Фамилия И.О.*

**РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:**

Доцент

*Должность, БУП*

Макеев Мстислав

Олегович

*Фамилия И.О.*