

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Ястребов Олег Александрович  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 29.05.2024 10:52:19  
Уникальный программный ключ:  
ca953a0120d891083f939673078ef1a989dae18a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»**

**Инженерная академия**

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

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

### **МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНООБЪЕКТОВ**

(наименование дисциплины/модуля)

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

#### **28.04.01 НАНОТЕХНОЛОГИИ И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА**

(код и наименование направления подготовки/специальности)

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

#### **ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ В НАНОИНДУСТРИИ**

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

**2024 г.**

## 1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Modeling of Nanoobjects» входит в программу магистратуры «Инженерно-физические технологии в наноиндустрии» по направлению 28.04.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника» и изучается во 2 семестре 1 курса. Дисциплину реализует Базовая кафедра «Нанотехнологии и микросистемная техника». Дисциплина состоит из 6 разделов и 38 тем и направлена на изучение методов моделирования нанообъектов.

Целью освоения дисциплины является изучение основ моделирования нанообъектов, включая методы теории функционала плотности (DFT).

## 2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Моделирование нанообъектов» 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)
УК-7	Способен искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	УК-7.1 Знает основные цифровые технологии, методы поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации, применяемые в современных условиях цифровой экономики; УК-7.2 Умеет искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными; УК-7.3 Владеет современными цифровыми технологиями, методами оценки информации, ее достоверности, построения логических умозаключений на основании поступающих информации и данных;
ОПК-5	Способен использовать инструментарий формализации инженерных, научно-технических задач, прикладное программное обеспечение для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов	ОПК-5.1 Знает основной инструментарий формализации инженерных, научно-технических задач, прикладное программное обеспечение для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов; ОПК-5.2 Умеет использовать прикладное программное обеспечение для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов нанотехнологий и микросистемной техники; ОПК-5.3 Владеет подходами для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов нанотехнологий и микросистемной техники;
ПК-3	Готовность разрабатывать физические и математические модели, проводить компьютерное моделирование исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и микросистемной техники	ПК-3.1 Знаком с программным обеспечением для компьютерного моделирования исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и микросистемной техники; ПК-3.2 Умеет разрабатывать физические и математические модели в области нанотехнологии и микросистемной техники; ПК-3.3 Владеет навыками компьютерного моделирования исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и микросистемной техники;

### 3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Моделирование нанообъектов» относится к обязательной части 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 нанообъектов».

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

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
УК-7	Способен искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	Основы применения нанотехнологий и микросистемной техники; Технологии программирования в наноиндустрии;	Технологическая практика; Преддипломная практика;
ОПК-5	Способен использовать инструментарий формализации инженерных, научно-технических задач, прикладное программное обеспечение для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов	Введение в микро- и наноэлектромеханические системы; Технологии программирования в наноиндустрии;	Научно-исследовательская; Технологическая практика;
ПК-3	Готовность разрабатывать физические и математические модели, проводить компьютерное моделирование исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и микросистемной техники	Технологии программирования в наноиндустрии; Квантовая механика в наносистемах;	Научно-исследовательская; 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 «Modeling of Nanoobjects» составляет «2» 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)
			2
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	17		17
Лекции (ЛК)	0		0
Лабораторные работы (ЛР)	17		17
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0		0
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	55		55
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	0		0
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	<b>ак.ч.</b>	<b>72</b>	72
	<b>зач.ед.</b>	<b>2</b>	2

## 5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

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

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)		Вид учебной работы*
Раздел 1	Initial concepts of the theory of multielectron systems	1.1	Wave function of a multielectron system	ЛР
		1.2	Symmetry of physical systems and types of wave functions	ЛР
		1.3	The concept of space and spin orbitals	ЛР
		1.4	Single and multi-determinant functions	ЛР
		1.5	Full energy	ЛР
		1.6	The structure of the potential energy surface	ЛР
Раздел 2	Self-consistent field equations	2.1	Energy of a one-determinant state	ЛР
		2.2	Closed and open shells	ЛР
		2.3	Variation of the total energy - the functional of the wave function	ЛР
		2.4	Method of indefinite Lagrange multipliers	ЛР
		2.5	Hartree-Fock equations	ЛР
		2.6	Expansion of orbitals in terms of basic functions	ЛР
		2.7	Base types	ЛР
		2.8	Rutan's equations	ЛР
		2.9	Population analysis	ЛР
		2.10	Block diagram of solutions of self-consistent field equations in quantum-chemical packages	ЛР
Раздел 3	Electron correlation	3.1	Post-Hartree-Fock approximations	ЛР
		3.2	Matrix of electron density of the 1st and 2nd order (correlation function)	ЛР
		3.3	Correlation hole function	ЛР
		3.4	Energy as a functional of density matrices	ЛР
Раздел 4	Density functional theory of Kohenberg-Kohn-Sham	4.1	Electron density as a fundamental variable	ЛР
		4.2	The first and second Kohenberg-Kohn theorems	ЛР
		4.3	Kohn-Sham equations	ЛР
Раздел 5	Exchange-correlation functionals	5.1	Local density approximation	ЛР
		5.2	Gradient expansion	ЛР
		5.3	Generalized Gradient decomposition (GGA)	ЛР
		5.4	Meta GGA	ЛР
		5.5	Hybrid functionality	ЛР
		5.6	Orbitally dependent functionals	ЛР
		5.7	DFT+U	ЛР
Раздел 6	Fundamentals of Solids Calculations	6.1	Bloch's theorem	ЛР
		6.2	Brillouin zones	ЛР
		6.3	Symmetrical points	ЛР
		6.4	Density of states	ЛР
		6.5	Basis plane waves	ЛР
		6.6	Pseudopotentials	ЛР
		6.7	Method of attached plane waves	ЛР
		6.8	Structure of popular packages for periodic DFT calculations (VASP, ESPRESSO)	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

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
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 / В.И. Барановский. - Электрон. дан. - 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 нанообъектов».

\* - 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 нанобъектов» 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*

Агасиева Светлана

Викторовна

*Фамилия И.О.*