

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 05.06.2025 09:59:02
Уникальный программный ключ:
sa953a0120c1891083f939673078ef1a989dac18a

**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 / 27.04.04 Управление
в технических системах**

(код и наименование направления подготовки/специальности)

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

НАНОТЕХНОЛОГИИ И ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2025 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Modeling of Nanoobjects» входит в программу магистратуры «Нанотехнологии и искусственный интеллект» по направлениям 28.04.01 Нанотехнологии и микросистемная техника / 27.04.04 Управление в технических системах 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)
ОПК-1	Способен анализировать и выявлять естественно-научную сущность проблем управления в технических системах на основе положений, законов и методов в области естественных наук и математики	ОПК-1.1 Знает основные законы, положения и методы в области естественных наук и математики;; ОПК-1.2 Умеет выявлять естественно-научную сущность проблем управления в технических системах руководствуясь законами и методами естественных наук и математики;; ОПК-1.3 Владеет инструментами анализа проблем управления в технических системах.;
ПК-2	Способен применять современные теоретические и экспериментальные методы разработки математических моделей исследуемых объектов и процессов, относящихся к профессиональной деятельности по направлению подготовки	ПК-2.1 Знает современные теоретические и экспериментальные методы, применяемые для разработки математических моделей исследуемых объектов и процессов профессиональной деятельности;; ПК-2.2 Умеет определять эффективность применяемых методов для разработки математических моделей исследуемых объектов и процессов;; ПК-2.3 Владеет современными теоретическими и экспериментальными методами для разработки математических моделей объектов и процессов профессиональной деятельности по направлению подготовки.;

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*
------	--------------------------	---	--

ОПК-1	Способен анализировать и выявлять естественно-	Алгоритмы и структуры данных; Квантовая механика в	Научно-исследовательская работа;
Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
	научную сущность проблем управления в технических системах на основе положений, законов и методов в области естественных наук и математики	наносистемах;	
ПК-2	Способен применять современные теоретические и экспериментальные методы разработки математических моделей исследуемых объектов и процессов, относящихся к профессиональной деятельности по направлению подготовки		Диагностические системы в нанотехнологиях; Научно-исследовательская работа; 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 «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
Контактная работа, ак.ч.	18		18
Лекции (ЛК)	0		0
Лабораторные работы (ЛР)	18		18
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0		0
Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.	54		54
Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.	0		0
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	72	72
	зач.ед.	2	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-Hartfock 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 <https://mega.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
 - ЭБС «Знаниум» <https://znaniyum.ru/>
2. Базы данных и поисковые системы
 - Sage <https://journals.sagepub.com/>
 - Springer Nature Link <https://link.springer.com/>
 - Wiley Journal Database <https://onlinelibrary.wiley.com/>
 - Научометрическая база данных Lens.org <https://www.lens.org>

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!**

РАЗРАБОТЧИК:

Доцент

Должность, БУП

Подпись

Карцев Алексей Иванович

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Заведующий кафедрой

Должность БУП

Подпись

Попов Сергей Викторович

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Доцент

Должность, БУП

Подпись

Агасиева Светлана
Викторовна

Фамилия И.О.

Заведующий кафедрой
механики и процессов
управления

Должность, БУП

Подпись

Разумный Юрий
Николаевич

Фамилия И.О.