

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Ястребов Олег Александрович  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 21.05.2025 10:30:23  
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 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)

**2025 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	Технологическая практика; Преддипломная практика; Научно-исследовательская работа;

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
		наноструктур 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;	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
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	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>

## 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	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

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
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.elsevier.com/locate/0021-9991>

*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!**

**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*

Макеев Мстислав

Олегович

*Фамилия И.О.*