

АННОТАЦИЯ

дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем»

Объем трудоемкости: 3 зачетных единицы (108 часов, из них – 68 часов аудиторной нагрузки: лекционных 32 ч., лабораторных 32 ч.; 39,8 часов самостоятельной работы; 4 часа КСР)

Цель дисциплины:

Целью изучения дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» является формирование у студентов представления о современных методах компьютерного моделирования, расчете свойств и характеристик при проектировании наносистем различной размерности.

Результатами изучения студентами дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» должно стать приобретение знаний и навыков по выбору методов компьютерного моделирования наносистем для решения задач практического проектирования наносистем с желаемыми/искомыми характеристиками.

Задачи дисциплины:

Задачами изучения дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» являются:

- формирование теоретических знаний в области методов компьютерного моделирования наноразмерных систем;
- формирование навыков по применению теоретических положений к описанию свойства наноструктур и наносистем различной пространственной размерности;
- формирование умений проектировать и использовать различные уровни моделирования наноразмерных систем и электронных приборов на их основе;
- формирование умений искать и анализировать научную литературу по моделированию наноразмерных систем и электронных приборов на их основе;
- организовывать в соответствии с научной организацией труда познавательную деятельность;
- развивать у обучающихся интегративный стиль мышления, познавательный интерес к новым разработкам в области моделирования структур для нанoeлектроники.

Место дисциплины в структуре ООП ВО

«Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» – интегративная научная дисциплина о применении теоретических положений к описанию свойства наноструктур с использованием современных машинных методов моделирования. Она раскрывает общие для всех наносистем закономерности образования и изменения физико-химических свойств в зависимости от типа наноструктур и пространственной размерности. На основе этой дисциплины в дальнейшем изучается дисциплина «Нанoeлектроника» и возможно применение результатов обучения студентами при подготовке выпускных квалификационных работ.

Дисциплина «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» как учебная дисциплина является составной частью блока Б1.В.ДВ «Дисциплины (модули) по выбору» учебного плана и относится к вариативной части дисциплин профессионального цикла (Б1.В.ДВ.02.01). Дисциплина «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» базируется на знании дисциплин университетского курса: атомной физики, физики наноразмерных систем, квантовой механики, основ математического анализа, информатики.

Изучение дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» включает аудиторные занятия со студентами (лекции, практические занятия), групповые и индивидуальные консультации, написание рефератов, устные доклады, самостоятельную работу студентов с учебной литературой, научными источниками.

Требования к уровню освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих профессиональных компетенций: ОПК-7, ПК-9, ПК-16.

№ п/п	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1	ОПК-7	способность учитывать современные тенденции развития электроники, измерительной и вычислительной техники, информационных технологий в своей профессиональной деятельности	возможности современных методов машинного моделирования наносистем и электронных приборов на их основе.	использовать компьютерные программы для моделирования наносистем и электронных приборов на их основе.	умением поиска информации по проектированию наносистем методами компьютерного моделирования.
2	ПК-9	готовность организовывать метрологическое обеспечение производства материалов и изделий электронной техники	возможности современных методов машинного моделирования наносистем для предсказания свойств материалов электронной техники.	использовать компьютерные программы для моделирования наносистем для целей метрологии свойств материалов электронной техники.	умением поиска информации по метрологии наносистем с помощью методов компьютерного моделирования.
3	ПК-16	готовность осуществлять регламентную проверку технического состояния оборудования, его профилактический осмотр и текущий ремонт	основные узлы ЭВМ для компьютерного моделирования наносистем.	диагностировать поломки и неисправности узлов ЭВМ для компьютерного моделирования наносистем.	навыками осмотра и ремонта неисправностей ЭВМ для компьютерного моделирования наносистем.

Основные разделы дисциплины:

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1	Введение. Потребность в моделировании и проектировании наносистем.	4	2			2
2	Современные теоретические подходы к моделированию наноразмерных систем.	6	2			4

3	Молекулярно-механические модели наносистем.	20	4		8	8
4	Неэмпирические методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров.	22	6		8	8
5	Полуэмпирические квантовохимические методы расчета наносистем.	20	4		8	8
6	Описание валентных взаимодействий в наносистемах.	4	2			2
7	Методы молекулярной динамики в моделировании нанообъектов.	16	4		8	4
8	Моделирование нековалентных взаимодействий в супрамолекулярных наноструктурах.	4	2		0	2
9	Моделирование периодических атомных и молекулярных систем.	4	2			2
10	Компьютерная реализация методов моделирования наносистем.	8	4			3,8
<i>Итого по дисциплине:</i>		107,8	32	0	32	39,8

Курсовые работы: *не предусмотрены*

Форма проведения аттестации по дисциплине: *зачет*

Основная литература:

1. Булавин Л.А., Выгорницкий Н.В., Лебовка Н.И. Компьютерное моделирование физических систем: учебное пособие. – Долгопрудный: Интеллект, 2011. – 349 с.
2. Матюшкин И.В. Моделирование и визуализация средствами MATLAB физики наноструктур: пособие. – М.: Техносфера, 2011. – 166 с.
3. Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия: физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы. Пер. с англ. Д. С. Безрукова, И. Г. Рябинкина; под ред. Н. Ф. Степанова. – Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. – 394 с.

Автор РПД:

В.Ю. Бузько, к.х.н., доцент