

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Физико-технический факультет



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.02.01 КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, РАСЧЕТ И ПРОЕКТИРОВАНИЕ НАНОСИСТЕМ

Направление подготовки/специальность
11.03.04 Электроника и наноэлектроника

Направленность (профиль) / специализация
Нанотехнология в электронике

Программа подготовки академическая

Форма обучения очная

Квалификация (степень) выпускника бакалавр

Краснодар 2017

Рабочая программа дисциплины Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению по направлению подготовки 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника направленности/профиля "Нанотехнологии в электронике"

Программу составил:

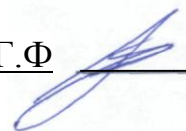
В.Ю. Бузько,

доцент кафедры радиофизики и нанотехнологий, к.х.н.



Рабочая программа дисциплины Физика наноразмерных систем утверждена на заседании кафедры радиофизики и нанотехнологий протокол № 16 «4» мая 2017 г.

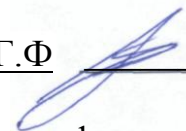
Заведующий кафедрой радиофизики и нанотехнологий Копытов Г.Ф.



Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры радиофизики и нанотехнологий

протокол № 9 «2» мая 2017 г.

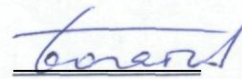
Заведующий кафедрой радиофизики и нанотехнологий Копытов Г.Ф.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии физико-технического факультета

протокол № 6 «16» мая 2017 г.

Председатель УМК факультета Богатов Н.М.



Рецензенты:

Исаев В.А., профессор кафедры физики и информационных систем ФТФ ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», доктор физико-математических наук.

Романов А.А., научный сотрудник АО «Научно-производственная компания «Мера», кандидат физико-математических наук.

1 Цели и задачи изучения дисциплины (модуля).

1.1 Цель освоения дисциплины.

«Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» – интегративная научная дисциплина о применении теоретических положений, современных методах компьютерного моделирования,

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.

1.2 Задачи дисциплины.

Задачами освоения 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 наноэлектроники.

В результате изучения настоящей дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» студенты должны получить базовые теоретические знания и навыков по выбору методов компьютерного моделирования наносистем для решения задач практического проектирования наносистем с желаемыми/искомыми характеристиками.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» (Б1.В.ДВ.02.01) для бакалавриата по направлению 11.03.04 Электроника и наноэлектроника профиля "Нанотехнологии в электронике" является составной частью вариативного блока Б1.В. учебного плана и относится части дисциплин профессионального цикла по выбору.

Дисциплина «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» частично базируется на знаниях предметов университетского курса: атомной физики, физики наноразмерных систем, квантовой механики, основ математического анализа, информатики. Освоение дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» позволит студентам применять полученные знания при подготовке выпускных квалификационных работ.

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.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся 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.

2. Структура и содержание дисциплины.

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ.

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зач.ед. (180 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице (для студентов ОФО).

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры (часы)	
		7	
Контактная работа, в том числе:			
Аудиторные занятия (всего)	64	64	
Занятия лекционного типа	32	32	

Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		36	36	
Лабораторные занятия		—	—	
Иная контактная работа:				
Контроль самостоятельной работы (КСР)		4	4	
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,2	0,2	
Самостоятельная работа, в том числе:		39,8	39,8	
Курсовая работа		—	—	
Проработка учебного (теоретического) материала		20	20	
Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)		5	5	
Реферат		6	6	
Подготовка к текущему контролю		4	4	
Контроль:				
подготовка к зачету		4,8	4,8	
Общая трудоемкость	час.	108	108	
	в том числе контактная работа	68,2	68,2	
	зач. ед.	3	3	

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.
Разделы (темы) дисциплины, изучаемые в 7 семестре (очная форма):

№	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Введение. Потребность в моделировании и проектировании наносистем.	2	2	—	—	2
2	Современные теоретические подходы к моделированию наноразмерных систем.	6	2	—	—	8
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	14
6	Описание валентных взаимодействий в наносистемах.	4	2	—	—	18
7	Методы молекулярной динамики в моделировании нанообъектов.	16	4	—	8	14
8	Моделирование нековалентных взаимодействий в супрамолекулярных наноструктурах.	4	2	—	—	
9	Моделирование периодических атомных и молекулярных систем.	4	2	—	—	
10	Компьютерная реализация методов моделирования наносистем.	8	4	—	—	9,8
Итого по дисциплине:		135,8	32	—	32	39,8

Примечание: Л – лекции, ПЗ – практические занятия / семинары, ЛР – лабораторные занятия, СРС – самостоятельная работа студента.

2.3 Содержание разделов (тем) дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа

№ раздела	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1	Введение. Потребность в моделировании и проектировании наносистем.	Введение. Потребность в моделировании и проектировании наносистем. Цели моделирования и искомые характеристики наносистем.	
2	Современные теоретические подходы к моделированию наноразмерных систем.	Цели моделирования. Физико-химические модели структуры нанообъектов. Классификация методов моделирования строения молекулярных, супрамолекулярных и наноструктурных систем. Использование экспериментальных данных для построения начальных моделей. Межчастичные взаимодействия в наноструктурах. Парные и трехчастичные потенциалы.	Д / Р
3	Механические модели наносистем.	Представление наносистемы в виде макромолекулы. Силовые поля и их параметры. Энергия: растяжения связи, угловой деформации, кручения. Алгоритмы молекулярной механики.	Д / Р
3	Механические модели наносистем.	Параметризация классических силовых полей. Компьютерная реализация моделирования различных типов наноструктур методами молекулярной механики. Практические приложения и ограничения методов молекулярной механики для разных типов наносистем.	КВ / Д / Р
4	Неэмпирические методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров.	Уравнение Шредингера для молекулярной системы. Свойства электронной волновой функции. Приближение Борна-Оппенгеймера. Иерархия методов квантовой химии. Метод Хартри-Фока. Электронная корреляция и методы ее учета. Метод конфигурационного взаимодействия. Теория возмущений. Метод связанных кластеров. Точность неэмпирических квантово-химических расчетов.	Д / Р
4	Неэмпирические методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров.	Теорема Хоэнберга-Кона. Теория Кона-Шэма. Функционалы электронной плотности. Локальные и нелокальные функционалы плотности. Градиентная коррекция. Проблемы использования функционалов плотности в описании свойств и характеристик наночастиц.	КВ / Д / Р
4	Неэмпирические	Базисные функции для неэмпирических расче-	КВ / Д / Р

	ские методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров.	тов. Номенклатура базисных наборов. Роль базисных функций в описании свойств наносистем. Компьютерные программы для неэмпирического моделирования наносистем.	
5	Полуэмпирические квантовохимические методы расчета наносистем.	Методы, основанные на пренебрежении дифференциальным перекрыванием. Методы, использующие р-электронное приближение. Точность и проблемы полуэмпирических квантово-химических расчетов.	Д / Р
5	Полуэмпирические квантовохимические методы расчета наносистем.	Особенности применения полуэмпирических методов для расчета различных типов наносистем. Компьютерные программы для полуэмпирического моделирования наносистем.	КВ / Д / Р
6	Описание валентных взаимодействий в наносистемах.	Молекулярные орбитали и их характеристики. Орбитальная картина химической связи. Анализ заселенностей атомных орбиталей. Перекрывание орбиталей. Пространственное распределение электронной плотности и заряда. Электростатический и энергетический аспекты описания химической связи. Локализация и гибридизация орбиталей. Модели электронной локализации и их орбитальное и квантово-топологическое обоснование.	Д / Р
7	Методы молекулярной динамики в моделировании нанобъектов.	Методы молекулярной динамики. Алгоритмы расчетов. Виды термостатов и баростатов. Особенности моделирование наноструктур методом молекулярной динамики.	Д / Р
7	Методы молекулярной динамики в моделировании нанобъектов.	Компьютерные программы молекулярной динамики и их характеристики. Преимущества и ограничения метода молекулярной динамики для изучения свойств наносистем.	КВ / Д / Р
8	Моделирование нековалентных взаимодействий в супрамолекулярных системах и наноструктурах.	Модели образования наноструктур. Потенциалы атомных и молекулярных взаимодействий. Водородная связь. Ван-дер-ваальсово взаимодействие. Понятие о супрамолекулярной химии. Иерархия построения супрамолекулярных наноразмерных систем.	Д / Р
9	Моделирование периодических атом-	Одноэлектронные волновые функции периодических структур и методы их расчета. Приближение локальной плотности. Уровень Фер-	Д / Р

	ных и молекулярных систем.	ми. Плотность состояний. Зонная структура и свойства твердых тел. Кластерное приближение. Электронное строение периодических наноструктур.	
10	Компьютерная реализация моделирования наносистем.	Использование структурных, спектральных и термодинамических баз данных для создания моделей наносистем. Кембриджская база структурных данных, база NIST, базы ИВТАН-термо и Fact. Подготовка данных, расчет и интерпретация результатов неэмпирических и полуэмпирических расчетов.	Д / Р

Примечание: КВ – ответы на контрольные вопросы, ПЗ – выполнение практических заданий.

2.3.2 Занятия семинарского типа.

Согласно учебному плану занятия семинарского типа по учебной дисциплине «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» не предусмотрены.

2.3.3 Лабораторные занятия.

В основе построения лабораторного практикума по компьютерному моделированию, расчетам и проектированию наносистем лежит последовательность поэтапных действий исследователя по планированию, подготовке, проведению моделирования наноструктур и анализу полученных данных.

№	Наименование раздела	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1	Механические модели наносистем.	«Моделирование углеродных наноструктур методом молекулярной механики»	Проверка результатов моделирования, оценивание участия в дискуссии.
2	Неэмпирические методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров.	«Неэмпирическое моделирование нанокластеров алюминия»	Анализ и оценивание деятельности студентов по планированию и выполнения вычислительного эксперимента.
3	Полуэмпирические квантовохимические методы расчета наносистем.	«Моделирование эффекта допирования атомами IIIA и VA групп на свойства графеновых наночастиц».	Проверка результатов моделирования, оценивание участия в дискуссии.
4	Описание валентных взаимодействий в наносистемах.	«Моделирование свойств нанопластин графена и силицена».	Проверка результатов моделирования, оценивание участия в дискуссии.
5	Методы молекулярной динамики в моделировании нано-	«МД-моделирование нанопровода на основе интеркаллированной атомами лития одностеночной УНТ»	Проверка результатов моделирования, оценивание уча-

	объектов.		ствия в дискуссии.
6	Моделирование нековалентных взаимодействий в супрамолекулярных системах и наноструктурах.	«Моделирование взаимодействия нанонитей карбина»	Проверка результатов моделирования, оценивание участия в дискуссии.
7	Обзор результатов компьютерного моделирования некоторых наноразмерных систем.	На выбор студентам даются следующие темы проверочных лабораторных работ: «Моделирование электронных свойств монослоев BN», «Моделирование электронных свойств монослоев GaN», «Моделирование электронных свойств нанонитей ZnS», «Моделирование электронных свойств нанонитей ZnO».	Защита проекта

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов).

Согласно учебному плану по данной дисциплине не предусмотрены курсовые работы (проекты).

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю).

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1.	Проработка учебного теоретического материала	Методические указания по изучению теоретического материала, утвержденные кафедрой радиофизики и нанотехнологий, протокол № 7 от 20.03.2017.
2.	Подготовка к защите лабораторных работ	Методические указания по выполнению лабораторных работ, утвержденные кафедрой радиофизики и нанотехнологий, протокол № 7 от 20.03.2017.
3.	Реферат	Бушенева Ю.И. Как правильно написать реферат, курсовую и дипломную работы: Учебное пособие для бакалавров [Электронный ресурс]: учеб. пособие – Электрон. дан. – М.: Дашков и К, 2016. – 140 с. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/93331 . Кузнецов И.Н. Рефераты, курсовые и дипломные работы. Методика подготовки и оформления [Электронный ресурс]: учеб. пособие – Электрон. дан. – М.: Дашков и К, 2016. – 340 с. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/93303 .
4.	Подготовка презентации по теме реферата	Вылегжанина А.О. Деловые и научные презентации [Электронный ресурс]: учебное пособие – Электрон. дан. – М., Берлин: Директ-Медиа, 2016. – 115 с. – Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&book_id=446660 .

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3. Образовательные технологии

Для формирования профессиональных компетенций в процессе освоения дисциплины используется технология профессионально-развивающего обучения, предусматривающая не только передачу теоретического материала, но и стимулирование и развитие продуктивных познавательных действий студентов (на основе психолого-педагогической теории поэтапного формирования умственных действий). Активизации и интенсификации познавательного процесса способствуют использование педагогической эвристики и моделирование проблемных ситуаций.

В процессе преподавания дисциплины используются следующие методы:

- лекции;
- домашние задания;
- проблемные задания;
- индивидуальные практические задания;
- контрольные опросы;
- публичная защита лабораторных работ;
- самостоятельная работа студентов (изучение теоретического материала, подготовка к лабораторным занятиям, выполнение домашних работ, подготовка к опросу и зачету).

В рамках практических занятий применяются методы проектного обучения, исследовательские методы, тренинговые формы, метод конкретных ситуаций. В процессе самостоятельной деятельности студенты осваивают и анализируют передовой научно-исследовательский опыт, используя имеющуюся литературу и информационные технологии, знакомятся с основными научными журналами по вопросам моделирования наноструктур различных типов, выступают с докладами перед однокурсниками, накапливают багаж знаний, полезных для выполнения выпускной квалификационной работы.

Сопровождение самостоятельной работы студентов также организовано в следующих формах:

- подробное изучение некоторых разделов дисциплины посредством изучения рекомендуемой дополнительной литературы;
- подробное изучение некоторых разделов дисциплины посредством подготовки сообщений, презентаций, путем написания реферативных работ;
- консультации для разъяснения проблемных моментов при самостоятельном расширенном изучении разделов дисциплины.

Основные образовательные технологии, используемые в учебном процессе:

- лекции с проблемным изложением;
- обсуждение сложных вопросов и проблем;
- применение метода конкретных ситуаций.

Интерактивные образовательные технологии, используемые в аудиторных занятиях:

- технология развития критического мышления;
- лекции с проблемным изложением;
- обсуждение сложных вопросов и проблем;
- творческие задания;

– работа в малых группах.

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля.

4.1.1 Примерные темы рефератов и докладов

В процессе подготовки докладов и рефератов формируются и оцениваются требуемые ФГОС и ООП для направления 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника профиля "Нанотехнология в электронике" компетенции – ОПК-7, ПК-9, ПК-16.

Ниже приводятся примеры тем докладов и рефератов для рабочей программы.

1. Основные методы компьютерного моделирования структурно-механических свойств наночастиц.
2. Методы компьютерного моделирования электронных свойств наночастиц.
3. Компьютерное моделирование наноразмерных элементов квантовой электроники.
4. Методы теории функционала плотности и их применение при моделировании свойств наноразмерных частиц.
5. Функционалы, применяемые при моделировании свойств наноразмерных частиц.
6. Полуэмпирические методы, применяемые для моделирования электронных свойств наносистем.
7. Эмпирические методы, применяемые для моделирования свойств наносистем.
8. Метод молекулярной динамики и его применение при моделировании свойств наноразмерных частиц.
9. Метод Монте-Карло и его применение при моделировании свойств наноразмерных частиц.
10. Специфика наноразмерных частиц как объектов компьютерного моделирования.
11. Методы компьютерного моделирования спектrofизических свойств наночастиц.
12. Компьютерное моделирование распространенных полупроводниковых наноматериалов.
13. Компьютерное моделирование новых полупроводниковых неорганических наноматериалов.
14. Компьютерное моделирование новых полупроводниковых органических наноматериалов.

4.1.2 Примеры практических заданий

В процессе подготовки и выполнения практических заданий формируются и оцениваются требуемые ФГОС и ООП для направления 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника профиля "Нанотехнология в электронике" компетенции – ОПК-7, ПК-9, ПК-16.

Ниже приводятся примеры практических заданий для рабочей программы.

Вопрос 1. Основная величина в теории функционала плотности это

- 1) многоэлектронная волновая функция; 2) атомная орбиталь; 3) электронная плотность; 4) электронно-ядерный потенциал.

Ответ –

Вопрос 2. Как в методе Кона-Шэма учитывается обменно-корреляционное взаимодействие электронов?

Вопрос 3. Приближение локальной плотности применяется в теории функционала плотности, чтобы

1) повысить точность расчета, 2) учесть спин электрона, 3) перенести формулы для однородного электронного газа на произвольные системы, 4) избежать итерационную процедуру расчета.

Ответ –

Вопрос 4. Уравнения Кона-Шэма являются

1) точными, 2) приближенными, 3) справедливыми для однородного электронного газа; 4) игнорирующими обмен электронов.

Ответ –

Вопрос 5. Энергия супрамолекулярной наночастицы при увеличении ее размера

1) увеличивается, 2) уменьшается, 3) изменяется бессистемно, 4) остается неизменной.

Ответ –

Вопрос 6. Метод Монте-Карло и метод молекулярной динамики

1) описывают все взаимодействия в системе; 2) не описывают нековалентные взаимодействия; 3) описывают только ковалентные взаимодействия; 4) применимы только для ионных связей

Ответ –

Вопрос 7. Потенциал в методе Монте-Карло и методе молекулярной динамики приближенно учитывает

1) все взаимодействия в системе; 2) все взаимодействия в системе, кроме кулоновских; 3) только водородные связи в системе; 4) только кулоновские взаимодействия

Ответ –

Вопрос 8. Движение частиц системы описывается методе молекулярной динамики

1) законами квантовой механики; 2) законами классической механики; 3) игнорируется; 4) учитывается в среднем

Ответ –

Вопрос 9. Разложение волновых функций по плоским волнам применяется, чтобы

1) упростить расчет; 2) ускорить расчет; 3) обойти самосогласование; 4) распространить расчет на периодические системы.

Ответ –

Вопрос 10. Применяется ли приближение Борна-Оппенгеймера при компьютерном моделировании наночастиц?

1) Да; 2) нет; 3) иногда, 4) только для молекулярных систем

Ответ –

4.1.3 Контрольные вопросы по учебной программе

В процессе подготовки и ответов на контрольные вопросы формируются и оцениваются требуемые ФГОС и ООП для направления 11.03.04 Электроника и наноэлектроника профиля "Нанотехнология в электронике" компетенции – ОПК-7, ПК-9, ПК-16.

Ниже приводятся примеры контрольных вопросов теме «Неэмпирические методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров». Полный комплект контрольных вопросов для основных разделов рабочей программы приводится в ФОС дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем».

1. Как решается уравнение Шредингера для наночастиц?
2. Каковы особенности приближения Борна-Оппенгеймера?
3. Какова иерархия основных неэмпирических методов квантовой химии.

4. Каковы особенности метода Хартри-Фока?
5. Как производится учет электронной корреляции?
6. Какова точность неэмпирических квантово-химических расчетов для наноструктур?
7. Какова основная величина в теории функционала плотности?
8. Как в методе Кона-Шэма учитывается обменно-корреляционное взаимодействие электронов?
9. Преимущества применения приближения локальной плотности в теории функционала плотности?
10. Являются ли уравнения Кона-Шэма точными?
11. Что такое обменно-корреляционный потенциал/функционал?
12. Какие виды обменно-корреляционных функционалов применяются при расчете электронных характеристик наночастиц и наносистем?
13. Какова точность расчетов методами теории функционала плотности для наноструктур?

4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

4.2.1 Вопросы, выносимые на зачет по дисциплине «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» для направления подготовки для направления подготовки 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника профиля "Нанотехнология в электронике".

В процессе подготовки и ответов на вопросы зачета формируются и оцениваются требуемые ФГОС и ООП для направления 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника профиля "Нанотехнология в электронике" компетенции – ОПК-7, ПК-9, ПК-16.

4.2.1 Вопросы для подготовки к зачету

1. Потребность в предсказании свойств наноструктур и наносистем.
2. Возможности методов машинного предсказания свойств наноструктур и наносистем.
3. Уравнение Шредингера для молекулярных систем.
4. Приближение Борна-Оппенгеймера. Динамические эффекты.
5. Метод Хартри-Фока-Рутаана. Методы теории возмущений и конфигурационного взаимодействия.
6. Метод теории функционала плотности Кона-Шэма.
7. Электронная плотность в методе Кона-Шэма.
8. Приближение локальной плотности. Обменно-корреляционные потенциалы.
9. Гибридные функционалы метода ТФП.
10. Электронные базисные наборы.
11. Полуэмпирические методы приближения INDO.
12. Полуэмпирические методы приближения MNDO.
13. Потенциалы, используемые в методах молекулярной динамики и Монте-Карло.
14. Факторы, учитываемые при построении потенциалов, используемых в методах молекулярной динамики и Монте-Карло.
15. Метод молекулярной динамики. Термостаты и баростаты.
16. Метод неэмпирической молекулярной динамики Кара-Парринело.
17. Электронная плотность в квантово-топологической теории молекулярной структуры.
18. Основные подходы компьютерного моделирования электронных свойств наносистем.
19. Основные подходы компьютерного моделирования спектrofизических свойств наносистем.

20. Основные подходы компьютерного моделирования структурно-механических свойств наносистем.
21. Конформационный анализ наночастиц.
22. Моделирование электронной структуры тубулярных наносистем: углеродные нанотрубки, нанопровода, наностручки.
23. Структура одномерных наносистем: нанонити, нанокабеля, наноусы.
24. Структура двумерных решеток: графен, силицен, боразен.
25. Эффекты допирования атомами IIIA и VA группы полупроводниковых наночастиц элементов IVA группы.
26. Моделирование электронных характеристик наносистем в электрических и магнитных полях.
27. Моделирование гетеропереходов в гибридных наносистемах.
28. Моделирование электронной эмиссии в наноконусах и наноусах.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на зачете;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля).

5.1 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.

Для освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья имеются издания в электронном виде в электронно-библиотечных системах «Лань» и «Юрайт».

5.2 Дополнительная литература

1. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. Пособие для студ. высш. учеб. заведений. – М.: Издательский центр «Академия». 2008. – 384 с.
2. Беленков Е.А., Ивановская В.В., Ивановский А.Л. Наноалмазы и родственные углеродные наноматериалы. Компьютерное материаловедение. Екатеринбург: УрО РАН. 2008. – 169 с.
3. Венер М.В., Цирельсон В.Г. Компьютерное моделирование супрамолекулярных систем и наноструктур. М.: РХТУ. 2008. – 128 с.
4. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строения, свойства, применения. – М.: Бином. Лаборатория знаний. 2006. – 293 с.
5. Дьячков П.Н. Электронные свойства и применение нанотрубок. – М.: Бином-Пресс. Лаборатория знаний. 2010. – 488 с.
6. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. – Ростов: Феникс, 2008. – 560 с.
7. Романова Т.А., Краснов П.О., Качин С.В., Аврамов П.В. Теория и практика компьютерного моделирования нанообъектов // Мультимедийное справочное пособие.- Красноярск: ИПЦ КТГУ. 2002. – 223 с.
8. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. М.: СОЛОН-Пресс. 2005. – 536 с.
9. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: УРСС. 2001. – 519 с.
10. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы, твердые тела. – М.: Бином, 2010. – 496 с.

5.3. Периодические издания:

1. Научно-теоретический журнал «*Физика твердого тела*»
2. Научно-теоретический журнал «*Журнал экспериментальной и теоретической физики*»
3. Научно-теоретический журнал «*Письма в ЖЭТФ*»
4. Научный обзорный журнал «*Успехи физических наук*»
5. Научный обзорный журнал «*Успехи химии*»
6. Научно-производственный журнал «*Нанотехнологии. Экология. Производство*».
7. Научный обзорный журнал «*Российские нанотехнологии*».

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля).

1. Научная электронная библиотека: <http://elibrary.ru>
2. Научная электронная библиотека: <http://cyberleninka.ru/>
3. Полнотекстовые архивы ведущих западных научных журналов на Российской платформе научных журналов НЭИКОН: <http://archive.neicon.ru>
4. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам»: <http://window.edu.ru/window>
5. Библиотека электронных учебников: <http://www.book-ua.org/>
6. Федеральный образовательный портал: http://www.edu.ru/db/portal/sites/res_page.htm
7. Каталог научных ресурсов: <http://www.scintific.narod.ru/literature.htm>
8. Большая научная библиотека: <http://www.sci-lib.com/>
9. Естественно-научный образовательный портал: <http://www.en.edu.ru/catalogue/>
10. Техническая библиотека: <http://techlibrary.ru/>

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля).

На самостоятельную работу студентов, согласно требованиям ФГОС ВО по направлению 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника профиля "Нанотехнология в электронике", отводится около 40,7 % времени (39,8 часов СРС) от общей трудоемкости дисциплины (108 часов). Сопровождение самостоятельной работы студентов может быть организовано в следующих формах:

- составлением индивидуальных планов самостоятельной работы каждого из студентов с указанием темы и видов занятий, форм и сроков представления результатов;
- проведением консультаций (индивидуальных или групповых), в том числе с применением дистанционной среды обучения.

Критерий оценки эффективности самостоятельной работы студентов формируется в ходе промежуточного контроля процесса выполнения заданий и осуществляется на основе различных способов взаимодействия.

В соответствии с этим при проведении оперативного контроля могут использоваться контрольные вопросы к соответствующим разделам основной дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем».

Контроль осуществляется посредством устного опроса студентов по окончании изучения тем учебной дисциплины и выполнения письменных контрольных работ.

Сопровождение самостоятельной работы студентов также организовано в следующих формах:

- усвоение, дополнение и вникание в разбираемые разделы дисциплины при помощи знаний получаемых по средствам изучения рекомендуемой литературы;
- путем написания реферативных работ и анализ результата их открытого доклада;
- консультации, организованные для разъяснения проблемных моментов при самостоятельном изучении тех или иных аспектов разделов усваиваемой информации в дисциплине.

К средствам обеспечения освоения дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» также относятся электронные варианты дополнительных учебных, научно-популярных и научных изданий по данной дисциплине.

Рекомендуется следующий график и календарный план самостоятельной работы студентов по учебным неделям (16 недель):

Типовые задания для самостоятельной работы студентов

№ темы	Тема или задание текущей работы	Кол-во часов	Форма представления результатов	Сроки выполнения (недели)
1.	Введение. Потребность в моделировании и проектировании наносистем.	2	Доклад. Реферат.	1
2.	Современные теоретические подходы к моделированию наноразмерных систем.	4	Доклад. Реферат.	2
3.	Молекулярно-механические модели наносистем.	8	Доклад. Реферат.	2
4.	Неэмпирические методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров.	8	Устный ответ. Доклад. Реферат.	3
5.	Полуэмпирические квантовохимические методы расчета наносистем.	8	Устный ответ. Доклад. Реферат.	2

6.	Описание валентных взаимодействий в наносистемах.	2	Доклад. Реферат.	2
7.	Методы молекулярной динамики в моделировании нанобъектов.	4	Устный ответ. Доклад. Реферат.	2
8.	Моделирование нековалентных взаимодействий в супрамолекулярных наноструктурах.	2	Доклад. Реферат.	2
9	Моделирование периодических атомных и молекулярных систем.	2	Доклад. Реферат.	1
10	Компьютерная реализация методов моделирования наносистем.	3,8	Доклад. Реферат.	1
Итого:		39,8		16

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала.

Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю).

8.1 Перечень информационных технологий.

В настоящее время все более возрастает роль информационно-социальных технологий в образовании, которые обеспечивают всеобщую компьютеризацию учащихся и преподавателей на уровне, позволяющем решать следующие основные задачи:

- обеспечение выхода в сеть Интернет каждого участника учебного процесса в любое время и из различных мест пребывания;
- развитие единого информационного пространства образовательных индустрий и присутствие в нем в различное время и независимо друг от друга всех участников образовательного и творческого процесса;
- создание, развитие и эффективное использование управляемых информационных образовательных ресурсов, в том числе личных пользовательских баз и банков данных и знаний учащихся и педагогов с возможностью повсеместного доступа для работы с ними.

Информационные образовательные технологии возникают при использовании средств информационно-вычислительной техники. Образовательную среду, в которой осуществляются образовательные информационные технологии, определяют работающие с ней компоненты:

- техническая (вид используемых компьютерной техники и средств связи);
- программно-техническая (программные средства поддержки реализуемой технологии обучения);
- организационно-методическая (инструкции учащимся и преподавателям, организация учебного процесса).

Под образовательными технологиями в высшей школе понимается система научных и инженерных знаний, а также методов и средств, которые используются для создания, сбора, передачи, хранения и обработки информации в предметной области высшей школы. Формируется прямая зависимость между эффективностью выполнения учебных программ и степенью интеграции в них соответствующих информационно-

коммуникационных технологий.

Информационная образовательная среда представляет собой информационную систему, объединяющую посредством сетевых технологий, программные и технические средства, организационное, методическое и математическое обеспечение, предназначенное для повышения эффективности и доступности образовательного процесса подготовки специалистов.

Характерной чертой образовательной среды является возможность студентов и преподавателей обращаться к структурированным учебно-методическим материалам, обучающим мультимедийным комплексам всего университета в любое время и в любой точке пространства. Помимо доступности учебного материала, необходимо обеспечить обучаемому возможность связи с преподавателем, получение консультации в он-лайн или офф-лайн режимах, а также возможность получения индивидуальной «навигации» в освоении того или иного предмета. Студенты будут стремиться к гибкому режиму обучения, модульным программам с многочисленными поступлениями и отчислениями, которые позволят накапливать зачетные единицы, свободно переводиться из одного вуза в другой с учетом предыдущего опыта, знаний и навыков. По-прежнему важной для студентов останется возможность личного развития и профессионального роста; программы получения степени и короткие курсы, возможно, будут пользоваться одинаковым спросом; резко возрастет потребность в программах профессионального обучения и аспирантских программах.

Разработчики дистанционного образования конкретизируют индивидуализацию образовательного поведения следующим образом, считая, что в дистанционном образовании наиболее ярко проявляются черты личностно-ориентированного способа обучения: гибкость, модульность, доступность, рентабельность, мобильность, охват, технологичность, социальное равноправие, интернациональность.

Важнейшие направления информатизации образования заключаются в следующем:

- реализация виртуальной информационно-образовательной среды на уровне учебного заведения, предусматривающая выполнение комплекса работ по созданию и обеспечению технологии его функционирования;

- системная интеграция информационных технологий в образовании, поддерживающих процессы обучения, научных исследований и организационного управления;

- построение и развитие единого образовательного информационного пространства.

Навыки пользования информационными технологиями включают в себя:

- базовые навыки (использование клавиатуры, мыши, принтера, операции с файлами и дисками);

- владение стандартным программным обеспечением (обработка текстов, создание таблиц, баз данных и т.д.);

- использование сетевых приложений (электронной почты, Интернета, веб-браузеров).

Таким образом, накопленный опыт применения информационных и дистанционных технологий в учебном процессе в различных вариантах позволяет говорить об определенных преимуществах подобных форм организации учебного процесса:

- становится возможной принципиально новая организация самостоятельной работы студентов;

- возрастает интенсивность учебного процесса;

- у студентов появляется дополнительная мотивация к познавательной деятельности;

- доступность учебных материалов в любое время;

- возможность самоконтроля степени усвоения материала по каждой теме неограниченное количество раз.

Следует отметить, что по мере накопления образовательных информационных ресурсов дистанционные технологии займут достойное место в образовательном процессе вуза, и станет возможным формирование на их основе разного уровня программ подго-

товки и переподготовки специалистов.

8.2 Перечень необходимого программного обеспечения.

1. Операционная система MS Windows (© Microsoft Corporation).
2. Интегрированное офисное приложение MS Office (© Microsoft Corporation).
3. Программное обеспечение для организации управляемого и безопасного доступа в Интернет.
4. Программное обеспечение для безопасной работы на компьютере – файловый антивирус, почтовый антивирус, веб-антивирус и сетевой экран.

8.3 Перечень информационных справочных систем:

1. Электронная библиотечная система eLIBRARY.RU:
<http://www.elibrary.ru>
2. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам»:
<http://window.edu.ru/window>
3. Рубрикон – крупнейший энциклопедический ресурс Интернета:
<http://www.rubricon.com/>
4. Аннотированный тематический каталог Интернет ресурсов по физике:
<http://www.college.ru/>
5. Каталог научных ресурсов:
<http://www.scintific.narod.ru/literature.htm>
6. Большая научная библиотека:
<http://www.sci-lib.com/>
7. Естественно-научный образовательный портал:
<http://www.en.edu.ru/catalogue/>
8. Техническая библиотека:
<http://techlibrary.ru/>
9. Физическая энциклопедия:
<http://www.femto.com.ua/articles/>
10. Академик – Словари и энциклопедии на Академике:
http://dic.academic.ru/dic.nsf/enc_physics/

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю).

Успешная реализация преподавания дисциплины «Физика наноразмерных систем» предполагает наличие минимально необходимого для реализации программы бакалавриата перечня материально-технического обеспечения:

- лекционные аудитории (оборудованные видеопроекционным оборудованием для презентаций, средствами звуковоспроизведения, экраном, и имеющие выход в Интернет);
- наличие необходимого лицензионного программного обеспечения (операционная система MS Windows XP; интегрированное офисное приложение MS Office).

При использовании электронных изданий вуз должен обеспечить каждого обучающегося во время самостоятельной подготовки рабочим местом в компьютерном классе с выходом в Интернет в соответствии с объемом изучаемых дисциплин.

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория № 227, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) и соответствующим программным обеспечением (ПО).

2.	Практические занятия	Лекционная аудитория № 230.
3.	Групповые (индивидуальные) консультации	Лекционные аудитории №227 и №144
4.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Лекционная аудитория №144
5.	Самостоятельная работа	Кабинет для самостоятельной работы №204, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», программой экранного увеличения и обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.

Рецензия

на рабочую программу дисциплины **Б1.В.ДВ.02.01 «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем»** для студентов 3 курса направления подготовки 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника (квалификация «бакалавр»).

Рабочая программа дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» включает следующие разделы: цели и задачи дисциплины, место дисциплины в структуре основной образовательной программы, перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы, общую трудоемкость дисциплины, образовательные технологии, формы промежуточной аттестации, описание учебно-методического, информационного и материально-технического обеспечения дисциплины. Программа соответствует ООП, рабочему учебному плану направления обучения.

Рабочая программа подготовки бакалавров по направлению 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника отвечает специфике будущей профессиональной деятельности выпускников, в том числе научно-исследовательской.

В рабочей программе дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» приведены примеры оценочных средств для проведения текущего и промежуточного контроля и критерия оценки уровня знаний обучающихся. В тематическом плане дисциплины выделены следующие составляющие: лекции, лабораторные занятия, а также самостоятельная работа студентов, что отвечает требованию ФГОС ВО.

В рабочей программе дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» содержание соответствует поставленным целям обучения, современному уровню и тенденциям развития науки и производства. Содержания разделов являются оптимальными в соответствии с распределением по видам занятий и трудоемкости в часах. Четко сформулированы планируемые результаты обучения: приобретаемые знания, умения, общие и профессиональные компетенции. Рабочая программа направлена в целом на формирование практических навыков, развития в студентах творческого подхода и системного мышления, достижения навыков исследователя и инженера.

Таким образом, рабочая программа дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» полностью соответствует ФГОС ВО и основной образовательной программе по направлению подготовки 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника профиля "Нанотехнология в электронике" (квалификация «бакалавр») и может быть использована в учебном процессе в ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет».

Заведующий кафедрой теоретической физики
физико-технического факультета ФГБОУ ВО «КубГУ»,
доктор физико-математических наук, профессор

_____ В.А. Исаев

Рецензия

на рабочую программу дисциплины **Б1.В.ДВ.02.01 «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем»** для студентов 3 курса направления подготовки **11.03.04 Электроника и наноэлектроника**
(квалификация «бакалавр»)

Программу подготовил кандидат химических наук, доцент кафедры радиофизики и нанотехнологий физико-технического факультета ФГБОУ ВО «КубГУ» Бузько Владимир Юрьевич.

Рабочая программа дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» включает следующие разделы: цели и задачи дисциплины, место дисциплины в структуре основной образовательной программы, перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы, общую трудоемкость дисциплины, образовательные технологии, формы промежуточной аттестации, описание учебно-методического, информационного и материально-технического обеспечения дисциплины.

В рабочей программе дисциплины «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» указаны примеры оценочных средств для контроля результатов обучения. В тематическом плане дисциплины выделены следующие составляющие: лекции, практические занятия и самостоятельная работа студентов, отвечающие требованиям образовательного стандарта. Рабочая программа подготовки бакалавров направления 11.03.04 Электроника и наноэлектроника отвечает специфике будущей научно-исследовательской и профессиональной деятельности выпускников.

Образовательные технологии характеризуются не только общепринятыми формами, но и выполнением индивидуальных практических заданий, активным вовлечением студентов в учебный процесс, использованием лекций с проблемным изложением, обсуждением сложных вопросов и проблем, проведением занятий в режимах взаимодействия «преподаватель – студент» и «студент – преподаватель», открытым выступлением на семинарских занятиях перед аудиторией сокурсников.

Таким образом, рабочая программа дисциплины полностью соответствует ФГОС ВО и основной образовательной программе по направлению подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника профиля "Нанотехнология в электронике" (квалификация «бакалавр») и может быть использована в учебном процессе в ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет».

Научный сотрудник АО «Научно-производственная компания
«Мера», кандидат физико-математических наук

Романов А.А.