

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
Факультет Физико-технический

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по учебной работе,  
качеству образования и качеству  
проектирования

  
Удальцов Г.А.  
подпись

« 31 » май 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)  
Б1.О.26 МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОЕКТИРОВАНИЕ  
НАНОСИСТЕМ**

*(код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом)*

Направление подготовки/специальность

11.03.04 Электроника и наноэлектроника

*(код и наименование направления подготовки/специальности)*

Направленность (профиль) / специализация

Нанотехнологии в электронике

*(наименование направленности (профиля) / специализации)*

Форма обучения очная  
*(очная, очно-заочная, заочная)*

Квалификация бакалавр

Краснодар 2019

Рабочая программа дисциплины Б1.О.26 «Моделирование и проектирование наносистем» составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки / специальности 11.03.04 Электроника и микроэлектроника

код и наименование направления подготовки

Программу составил:

В.Ю. Бузько, доцент кафедры радиофизики и нанотехнологий, к.х.н.

И.О. Фамилия, должность, ученая степень, ученое звание

\_\_\_\_\_ подпись

Рабочая программа дисциплины Б1.О.26 «Моделирование и проектирование наносистем» утверждена на заседании кафедры радиофизики и нанотехнологий

протокол № 7 «14» мая 2019 г.

Заведующий кафедрой (разработчик) Копытов Г.Ф.

фамилия, инициалы

\_\_\_\_\_ подпись

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры радиофизики и нанотехнологий

протокол № 7 «14» мая 2019 г.

Заведующий кафедрой (выпускающей) Копытов Г.Ф.

фамилия, инициалы

\_\_\_\_\_ подпись

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета физико-технического

протокол № 11 «21» мая 2019 г.

Председатель УМК факультета Богатов Н.М.

фамилия, инициалы

\_\_\_\_\_ подпись

Рецензенты:

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

\_\_\_\_\_ Куликов О.Н., кандидат физико-математических наук, начальник бюро патентной и научно-технической информации АО «КБ «Селена»

## **1 Цели и задачи изучения дисциплины (модуля).**

### **1.1 Цель освоения дисциплины.**

«Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» является формированием 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.

### **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 нанoeлектроники.

### **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 нанoeлектроника профиля "Нанотехнологии в электронике" является составной частью вариативного блока Б1.В. учебного плана и относится к части дисциплин профессионального цикла по выбору.

Дисциплина «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» частично базируется на знании 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 *общепрофессиональных и профессиональных компетенций*:

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1.	ОПК-7	студент обладает способностью 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	студент обладает готовностью 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	студент обладает готовностью 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 неисправной 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. (108 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице (для студентов ОФО).

Вид учебной работы		Всего часов	Семестры (часы)		
			7		
<b>Контактная работа, в том числе:</b>		<b>68,2</b>	<b>68,2</b>		
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>		<b>64</b>	<b>64</b>		
Занятия лекционного типа		32	32		
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		32	32		
Лабораторные занятия		–	–		
<b>Иная контактная работа:</b>		<b>4,2</b>	<b>4,2</b>		
Контроль самостоятельной работы (КСР)		4	4		
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,2	0,2		
<b>Самостоятельная работа, в том числе:</b>		<b>39,8</b>	<b>39,8</b>		
Курсовая работа		–	–		
Проработка учебного (теоретического) материала		20	20		
Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)		9,8	9,8		
Реферат		6	6		
Подготовка к текущему контролю		4	4		
<b>Контроль:</b>		<b>–</b>	<b>–</b>		
подготовка к зачету		4	4		
<b>Общая трудоемкость</b>	<b>час.</b>	<b>108</b>	<b>108</b>		
	<b>в том числе контактная работа</b>	<b>68,2</b>	<b>68,2</b>		
	<b>зач. ед.</b>	<b>3</b>	<b>3</b>		

## 2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам (темам) дисциплины.

Разделы (темы) дисциплины, изучаемые в 7 семестре:

№ 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	20	6		8	6
5	Полуэмпирические квантовохимические методы расчета наносистем	18	4		8	6

№ разд ела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа СР
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
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		–	2
9	Моделирование периодических атомных и молекулярных систем	4	2		–	2
10	Компьютерная реализация методов моделирования наносистем	7,8	4		–	3,8
<b>Итого по дисциплине:</b>		<b>103,8</b>	<b>32</b>		<b>32</b>	<b>39,8</b>

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

## 2.3 Содержание разделов (тем) дисциплины:

### 2.3.1 Занятия лекционного типа

№ разде ла	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	КВ / Д / Р

		молекулярной механики. Практические приложения и ограничения методов молекулярной механики для разных типов наносистем.	
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 методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров.	Базисные функции для неэмпирических расчетов. Номенклатура базисных наборов. Роль базисных функций в описании свойств наносистем. Компьютерные программы для неэмпирического моделирования наносистем.	КВ / Д / Р
5	Полуэмпирические квантовохимические методы расчета наносистем.	Методы, основанные на пренебрежении дифференциальным перекрытием. 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. Перекрытие 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	Методы молекулярной динамики. Алгоритмы расчетов. Виды термостатов и баростатов. Особенности моделирование наноструктур	Д / Р

	моделирование и нанобъектов.	методом молекулярной динамики.	
7	Методы молекулярной динамики в моделировании и 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 атомных и молекулярных систем.	Одноэлектронные волновые функции периодических структур и методы их расчета. Приближение локальной плотности. Уровень Ферми. Плотность состояний. Зонная структура и свойства твердых тел. Кластерное приближение. Электронное строение периодических наноструктур.	Д / Р
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 дисциплине «Компьютерное моделирование, расчет и проектирование 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	Молекулярно-	«Моделирование углеродных	Проверка

	механические модели наносистем.	наноструктур методом молекулярной механики»	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 выполнению 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 нанообъектов.	«МД-моделирование нанопровода на основе интеркаллированной атомами лития одностеночной УНТ»	Проверка результатов моделирования, оценивание участия 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

Лабораторные работы выполняются в НОЦ «Диагностика структуры и свойств наноматериалов» Кубанского государственного университета.

В результате выполнения лабораторных работ у студентов формируются и оцениваются требуемые ФГОС и ООП для направления 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника профиля «Нанотехнологии в электронике» компетенции – ОПК-7, ПК-9, ПК-16.

### 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: <a href="https://e.lanbook.com/book/93331">https://e.lanbook.com/book/93331</a> .
		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: <a href="https://e.lanbook.com/book/93303">https://e.lanbook.com/book/93303</a> .
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: <a href="http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&amp;book_id=446660">http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&amp;book_id=446660</a> .

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:
    - проблемная лекция;
    - лекция-пресс-конференция;
    - организационно-деятельностная игра.
  - Для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

### **Интерактивные образовательные технологии**

<b>Семестр</b>	<b>Вид занятия</b>	<b>Используемые интерактивные образовательные технологии</b>	<b>Количество часов</b>
7	Лекция № 1. Введение. Потребность в моделировании и проектировании наносистем	<b>Проблемная лекция.</b> Особенности математического моделирования в задачах проектирования наносистем.	2
	Лекция №2. Современные теоретические подходы к моделированию наноразмерных систем.	<b>Проблемная лекция.</b> Макромолекулярные и супрамолекулярные наноструктуры. Силовые поля. Энергия.	2
	Лекция № 3-4. Молекулярно-механические модели наносистем.	<b>Лекция-пресс-конференция.</b> 1. Уравнение Шредингера для молекулярной системы. 2. Приближение Борна-	4

	Оппенгеймера.	
Лекция №5-7. Неэмпирические методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров.	<b>Лекция-пресс-конференция.</b> 1. <a href="#">Теория</a> функционала. 2. Теорема Хознберга-Кона. 3. Теория Кона-Шэма.	6
Лекция №8-9. Неэмпирические методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров.	<b>Лекция-пресс-конференция.</b> 1. Базисные функции для неэмпирических расчетов. Номенклатура базисных наборов. 2. Компьютерные программы для неэмпирического моделирования наносистем.	4
Занятие лабораторного типа № 1-4. Молекулярно-механические модели наносистем	<b>Организационно-деятельностная игра на тему:</b> «Моделирование углеродных наноструктур методом молекулярной механики»	8
Занятие лабораторного типа № 5-6. Неэмпирические методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров.	<b>Организационно-деятельностная игра на тему:</b> «Неэмпирическое моделирование нанокластеров алюминия»	4
<i>Итого:</i>		<i>30</i>

•

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

Оценочными средствами для текущего контроля успеваемости являются: **реферат и доклад, практические занятия, контрольные вопросы.**

##### 4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля.

###### 4.1.1 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 «Нанотехнологии в электронике» компетенции – ОПК-7, ПК-9.

Ниже приводятся примеры 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 спектрофизических свойств наночастиц.
12. Компьютерное моделирование распространенных полупроводниковых наноматериалов.
13. Компьютерное моделирование новых полупроводниковых неорганических наноматериалов.
14. Компьютерное моделирование новых полупроводниковых органических наноматериалов.

*Перечень частей компетенций, проверяемых оценочным средством:*

ОПК-7: уметь использовать компьютерные программы для моделирования наносистем и электронных приборов на их основе; владеть умением поиска информации по проектированию наносистем методами компьютерного моделирования.

ПК-9: знать возможности современных методов машинного моделирования наносистем для предсказания свойств материалов электронной техники; уметь использовать компьютерные программы для моделирования наносистем для целей метрологии свойств материалов электронной техники; владеть умением поиска информации по метрологии наносистем с помощью методов компьютерного моделирования.

*Критерии оценки доклада:*

Отметка «зачтено» выставляется студенту, если доклад соответствует предъявляемым к нему требованиям по объему и структуре и высказано собственное суждение по рассматриваемой теме.

Отметка «не зачтено» выставляется студенту, если в докладе отсутствует соответствие между заданной темой реферативной работы и изученными научными источниками, источник плохо проанализирован, собственных суждений по докладу студент не имеет.

*Критерии оценки реферата:*

- оценка «отлично» выставляется студенту, если реферат соответствует предъявляемым к нему требованиям по объему, структуре, оформлению и при написании реферата студентом была глубоко изучена научная литература, отражены существующие в науке точки зрения и высказано собственное суждение по рассматриваемой теме.

- оценка «хорошо» выставляется студенту, если реферат соответствует предъявляемым к нему требованиям по объему, структуре, оформлению и при написании реферата им была изучена научная литература, отражены существующие в науке точки зрения, но не высказано собственное суждение по рассматриваемой теме, имеются незначительные пробелы в изложении научного материала по теме.

- оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если при написании реферата вопросы темы раскрыты недостаточно полно, имеются недостатки в оформлении реферативной работы.

- оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если в реферате присутствует плагиат, студент не проявил самостоятельности при выполнении научной работы, заимствовал материал, отсутствует соответствие между темой реферативной работы и изученными научными источниками; работа выполнена с грубыми нарушениями требований к оформлению, при защите реферата студентом продемонстрировано отсутствие знаний необходимого материала по теме.

#### **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 «Нанотехнологии 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 –

*Перечень частей компетенций, проверяемых оценочным средством:*

ОПК-7: уметь использовать компьютерные программы для моделирования наносистем и электронных приборов на их основе; владеть умением поиска информации по проектированию наносистем методами компьютерного моделирования.

ПК-9: знать возможности современных методов машинного моделирования наносистем для предсказания свойств материалов электронной техники.

ПК-16: знать основные узлы ЭВМ для компьютерного моделирования наносистем; уметь диагностировать поломки и неисправности узлов ЭВМ для компьютерного моделирования наносистем; владеть навыками осмотра и ремонта неисправностей ЭВМ для компьютерного моделирования наносистем.

*Критерии оценки:*

- оценка **«отлично»**: студент свободно отвечает на данные выше вопросы, активно участвует в дискуссии и в работе научного коллектива, речь отличается грамотностью, использованием профессионально-ориентированной терминологии; допустимы заминки и непродолжительные остановки;

- оценка **«хорошо»**: студент отвечает на данные выше вопросы, участвует в дискуссии и в работе научного коллектива, речь отличается грамотностью, использованием профессионально-ориентированной терминологии; но присутствуют непродолжительные остановки и негрубые ошибки;

- оценка **«удовлетворительно»**: студент не дает полноценного связного ответа на вопрос, но коммуникативный замысел просматривается и в целом содержание можно считать верным, у студента присутствуют некоторые трудности в участии в беседе и работе в научном коллективе, большое количество ошибок в определении рабочих понятий; студент не владеет в достаточной степени навыком филологического анализа текстов романтизма и реализма;

- оценка **«неудовлетворительно»**: студент не дает связного ответа на вопрос или высказывания поверхностны и неясны, у студента трудности в участии в беседе и работе в научном коллективе, большое количество ошибок в определении рабочих понятий.

### 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 «Нанотехнологии в электронике» компетенции – ОПК-7, ПК-9, ПК-16.

Ниже приводятся примеры контрольных вопросов для рабочей программы.

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?

*Перечень частей компетенций, проверяемых оценочным средством:*

ОПК-7: владеть умением поиска информации по проектированию наносистем методами компьютерного моделирования.

ПК-9: знать возможности современных методов машинного моделирования наносистем для предсказания свойств материалов электронной техники; уметь использовать компьютерные программы для моделирования наносистем для целей метрологии свойств материалов электронной техники.

ПК-16: знать основные узлы ЭВМ для компьютерного моделирования наносистем; владеть навыками осмотра и ремонта неисправностей ЭВМ для компьютерного моделирования наносистем.

*Критерии оценки:*

Оценка «зачтено» ставится, если продемонстрирован достаточный уровень эрудированности студента, выводы и наблюдения самостоятельны, соблюдена культура устного и письменного изложения материала и в целом продемонстрированы знания и умения необходимых компетенций.

Оценка «не зачтено» ставится, если студент не может дать правильные ответы на 80% вопросов или не соблюдены хотя бы 2 из оставшихся требований.

## **4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.**

**4.2.1 Вопросы, выносимые на экзамен по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем» для направления подготовки для направления подготовки 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника профиля «Нанотехнологии в электронике».**

### **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, наносуы.
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 наносуах.

*Перечень частей компетенций, проверяемых оценочным средством:*

ОПК-7: знать возможности современных методов машинного моделирования наносистем и электронных приборов на их основе; уметь использовать компьютерные программы для моделирования наносистем и электронных приборов на их основе; владеть умением поиска информации по проектированию наносистем методами компьютерного моделирования.

ПК-9: знать возможности современных методов машинного моделирования наносистем для предсказания свойств материалов электронной техники; уметь использовать компьютерные программы для моделирования наносистем для целей метрологии свойств материалов электронной техники; владеть умением поиска информации по метрологии наносистем с помощью методов компьютерного моделирования.

ПК-16: знать основные узлы ЭВМ для компьютерного моделирования наносистем; уметь диагностировать поломки и неисправности узлов ЭВМ для компьютерного моделирования наносистем; владеть навыками осмотра и ремонта неисправностей ЭВМ для компьютерного моделирования наносистем.

Оценка знаний на зачете производится по следующим *критериям*:

- оценка «зачтено» выставляется студенту, если он обладает знанием основного материала, хотя и допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, затруднения при выполнении практических задач незначительны;

- оценка «не зачтено» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с большими затруднениями решает практические задачи или не справляется с ними самостоятельно.

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](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 наноэлектроника 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		1

2.	Современные теоретические подходы к моделированию наноразмерных систем.	4	Доклад. Реферат.	2
3.	Молекулярно-механические модели наносистем.	8	Устный ответ. Доклад. Реферат. Проверка результатов моделирования. Оценивание участия в дискуссии.	3
4.	Неэмпирические методы расчета строения и свойств молекул и нанокластеров.	6	Устный ответ. Доклад. Реферат. Анализ и оценивание деятельности студентов по планированию и выполнения вычислительного эксперимента.	2
5.	Полуэмпирические квантовохимические методы расчета наносистем.	6	Устный ответ. Доклад. Реферат. Проверка результатов моделирования, оценивание участия в дискуссии.	2
6.	Описание валентных взаимодействий в наносистемах.	2	Доклад. Реферат. Проверка результатов моделирования, оценивание участия в дискуссии.	2
7.	Методы молекулярной динамики в моделировании нанообъектов.	4	Устный ответ. Доклад. Реферат. Проверка результатов моделирования. Оценивание участия в дискуссии.	2
8.	Моделирование нековалентных взаимодействий в супрамолекулярных наноструктурах.	2	Доклад. Реферат.	1
9	Моделирование периодических атомных и молекулярных систем.	2	Доклад. Реферат.	1

10	Компьютерная реализация методов моделирования наносистем.	3,8	Доклад. Реферат.	1
<b>Итого:</b>		<b>39,8</b>		<b>16</b>

**Занятия лекционного типа** являются одной из основных форм обучения студентов, во время которых студентам предоставляется возможность ознакомиться с основными научно-теоретическими положениями, проблемами дисциплины, получить необходимое направление и рекомендации для самостоятельной работы с учебниками, учебными пособиями, при подготовке к семинарским занятиям. Лекция является результатом кропотливой подготовки преподавателя, изучения и обобщения научной и учебной литературы. Столь же усердной должна быть и подготовка студента накануне лекции, посредством изучения соответствующей учебной литературы, повторения ранее пройденных тем.

Во время лекции следует записать дату ее проведения, тему, план лекции, вопросы, которые выносятся на самостоятельное изучение, отметить новинки учебной и научной литературы, рекомендованные лектором. Студентам рекомендуется конспектировать ее основные положения, не стоит пытаться дословно записать всю лекцию, поскольку скорость лекции не рассчитана на дословное воспроизведение выступления лектора в конспекте, тем не менее она является достаточной для того, чтобы студент смог не только усвоить, но и зафиксировать на бумаге сущность затронутых лектором проблем, выводы, а также узловые моменты, на которые обращается особое внимание в ходе лекции. На лекции студенту рекомендуется иметь на столах помимо конспектов также программу курса, которая будет способствовать развитию мнемонической памяти, возникновению ассоциаций между выступлением лектора и программными вопросами. В случае возникновения у студента по ходу лекции вопросов, их следует задавать сразу же или в конце лекции в специально отведенное для этого время.

**Лабораторные работы** составляют важную часть профессиональной подготовки студентов. Они направлены на экспериментальное подтверждение теоретических положений и формирование учебных и профессиональных практических умений.

Выполнение студентами лабораторных работ направлено на:

- обобщение, систематизацию, углубление, закрепление полученных теоретических знаний по конкретным темам дисциплин;
- формирование необходимых профессиональных умений и навыков;

Методические указания по проведению лабораторных работ разрабатываются на срок действия рабочей программы дисциплины и включают:

- заглавие, в котором указывается вид работы (лабораторная), ее порядковый номер, объем в часах и наименование;
- цель работы;
- предмет и содержание работы;
- порядок (последовательность) выполнения работы;
- общие правила к оформлению работы;
- контрольные вопросы и задания;
- список литературы (по необходимости).

Состав заданий для лабораторной работы должен быть спланирован с таким расчетом, чтобы за отведенное время они могли быть качественно выполнены большинством студентов.

Необходимыми структурными элементами лабораторной работы, помимо самостоятельной деятельности студентов, являются инструктаж, проводимый преподавателем, а также организация обсуждения итогов выполнения лабораторной работы.

Выполнению лабораторных работ предшествует проверка знаний студентов – их теоретической готовности к выполнению задания.

Порядок проведения лабораторных работ в целом совпадает с порядком проведения практических занятий. Помимо собственно выполнения работы для каждой лабораторной работы предусмотрена процедура защиты, в ходе которой преподаватель проводит устный или

письменный опрос студентов для контроля понимания выполненных ими измерений, правильной интерпретации полученных результатов и усвоения ими основных теоретических и практических знаний по теме занятия.

**Самостоятельная работа** содержит следующие виды учебной деятельности студентов:

- теоретическую самоподготовку к лабораторным занятиям и к зачету по конспектам и учебной литературе;
- оформление отчетов по результатам лабораторных работ (о выполненной лабораторной работе студенты отчитываются преподавателю на следующем (очередном) лабораторном занятии);
- подготовка реферата по одной из тем учебной дисциплины;
- подготовка презентации по теме реферата и выступление с докладом на одном из лекционных занятий.

Студенту необходимо систематически работать в течение семестра по изучению теоретического материала и приобретению навыков экспериментальной работы.

Для запоминания лекционного материала (в том числе и в период подготовки к зачету) студенту необходимо хорошо знать свойства памяти и активно пользоваться мнемотехническими приемами, известными из учебной дисциплины «Психология и педагогика». Методические рекомендации по запоминанию можно найти и в Интернете по ключевым словам: «память»,

«мнемоника», «мнемотехника», «как запомнить учебный материал». Желательно также ознакомиться с приемами конспектирования, т.е. со способами сокращения записи слов и словосочетаний, например, применяемыми в словарях и энциклопедиях.

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

При подготовке доклада, который представляет собой научное сообщение, студенты творчески проводят поиск литературных источников и их анализ в соответствии с выбранной тематикой.

**Доклад** — это результат самостоятельной работы студента, представляющий собой краткое устное изложение в течении 5-8 минут результатов теоретического анализа или экспериментального исследования в рамках определенной научной темы. В ходе публичного доклада студент должен раскрыть суть анализируемой работы и высказать собственные взгляды на рассматриваемые проблемы.

Подготовка докладов необходима в целях приобретения студентами необходимой профессиональной подготовки, развития умения и навыков самостоятельного поиска и анализа научных источников. С помощью доклада студенты при его прослушивании глубже постигают сложные проблемы курса, учатся лаконично пересказывать содержимое научных источников, обобщать выводы и делать заключение.

Подготовка доклада способствует формированию умения поиска научных источников и развитию умения анализировать научные статьи и сообщения.

Качество доклада оценивается по тому, насколько его содержание соответствует заданной теме, какие использованы первоисточники, насколько последовательно он изложен.

**Реферат** — это результат самостоятельной работы студента, представляющий собой краткое изложение в письменной форме полученных результатов теоретического анализа определенной научной темы, где автор должен раскрыть суть исследуемой проблемы, привести существующие разные научные точки зрения, высказать собственные взгляды на рассматриваемые проблемы.

При подготовке реферата, который представляет собой научное сообщение, студент должен изучить и обобщить научную литературу. На основе изученного материала студент раскрывает содержание выбранной темы реферата, акцентируя внимание на актуальные и проблемные вопросы. Реферат должен быть оформлен в соответствии с требованиями, предъявляемыми для оформления письменных работ.

Написание реферата необходимо в целях приобретения студентами необходимой профессиональной подготовки, развития умения и навыков самостоятельного научного поиска. С помощью реферата студент глубже постигает наиболее сложные проблемы дисциплины, учиться лаконично излагать свои мысли, докладывать результаты своего труда.

Подготовка реферата способствует формированию научной культуры у выпускника, закреплению у него научных знаний, развитию умения самостоятельно анализировать различные научные источники.

Оформление реферата:

1. Реферат должен иметь следующую структуру: а) план; б) введение; в) изложение основного содержания темы; г) заключение; д) список использованной литературы.

2. Общий объём – 8-10 с. основного текста.

3. Перед написанием должен быть составлен план работы, который обычно включает 2–3 вопроса. План не следует излишне детализировать, в нём перечисляются основные, центральные вопросы темы.

4. В процессе написания работы студент имеет право обратиться за консультацией к преподавателю.

5. В основной части работы большое внимание следует уделить глубокому теоретическому освещению основных вопросов темы, правильно увязать теоретические положения с практикой, конкретным фактическим и цифровым материалом.

6. В реферате обязательно отражается использованная литература, которая является завершающей частью работы.

7. Особое внимание следует уделить оформлению.

8. При защите реферата выставляется дифференцированная оценка.

9. Реферат, не соответствующий требованиям, предъявляемым к данному виду работы, возвращается на доработку.

Рефераты выполняются на листах формата А4. Страницы текста, рисунки, формулы нумеруются. Текст следует печатать шрифтом № 12 с интервалом между строками в 1,5 интервала.

Качество реферата оценивается по тому, насколько полно раскрыто содержание темы, использованы первоисточники, логичное и последовательное изложение. Оценивается и правильность подбора основной и дополнительной литературы (ссылки по правилам: фамилии и инициалы авторов, название книги, место издания, издательство, год издания, страница).

Объективность оценки работы преподавателем заключается в определении ее положительных и отрицательных сторон, по совокупности которых он окончательно оценивает представленную работу. При отрицательной рецензии работа возвращается на доработку с последующим представлением на повторную проверку с приложением замечаний, сделанных преподавателем.

С точки зрения методики проведения семинара представляет собой комбинированную, интегративную форму учебного занятия. Для подготовки и точного и полного ответа на семинарском занятии студенту необходимо серьезно и основательно подготовиться. Для этого он должен уметь работать с учебной и дополнительной литературой, а также знать основные критерии для написания реферата или подготовки доклада, если семинар проходит в данной форме. В конце занятия, после подведения его итогов преподавателем студентам рекомендуется внести изменения в свои конспекты, отметить информацию, прозвучавшую в выступлениях других студентов, дополнения, сделанные преподавателем и не отраженные в конспекте.

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 подготовки 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/](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.

### **НОЦ «ДССН» КубГУ**

Лабораторные занятия по дисциплине: «Компьютерное моделирование наносистем»	Оборудование и программно-техническое оснащение учебно-научной лаборатории:	Кол-во
	Персональные электронно-вычислительные машины: CPU с частотой более 2,4 ГГц, LCD	3
	Microsoft Office 2003, 2010	3
	Операционная система Windows XP	3
	Вытяжные шкафы химические	2
	Электроплитки химические	2

	Электронные весы	1
	Сушильный шкаф	1
	Растровый электронный микроскоп сверхвысокого разрешения JEOL JSM7500F	1
	Спектрометр электронного парамагнитного резонанса JEOL JES-FA300	
	Установка магнетронного напыления Q150T ES	1
	Установка для осаждения тонких пленок CCR Corra Cube ISSA	1
	Микроинтерферометр МИИ-4М	1
	Рабочий стол	4
	Стулья	8