

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 01.06.2023 01:03:31
Уникальный программный ключ:
ca953a0120d891083f939673078ef1a989dae18a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»
Инженерная академия**

(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Modelling of nanodevices

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

28.03.02 Наноинженерия

(код и наименование направления подготовки/специальности)

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

Нанотехнологии и наноматериалы в приборостроении

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2023 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

The objectives of the course are to introduce students to the fundamentals of the nanodevices modeling, including density functional theory (DFT) methods of the modeling. In practical classes, it is proposed to master these software packages to a level that allows you to independently solve specific practical problems.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Modelling of nanodevices» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
ПК-2	Способен осуществлять моделирование принципиальных схем микроэлектромеханической системы и цифровых схем управления	ПК-2.1 Знает программное обеспечение для моделирования принципиальных схем микроэлектромеханической системы и цифровых схем управления
		ПК-2.2 Умеет выполнять моделирование принципиальных схем микроэлектромеханической системы и цифровых схем управления
ПК-8	Способен осуществлять подготовку технических решений по оптимизации технологического процесса изготовления микро- и наноразмерных электромеханических систем	ПК-8.1 Знает типовые технические решения по оптимизации технологического процесса изготовления микро- и наноразмерных электромеханических систем
		ПК-8.2 Умеет осуществлять подготовку технических решений по оптимизации технологического процесса изготовления микро- и наноразмерных электромеханических систем

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Modelling of nanodevices» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока Б1 ОП ВО.

В рамках ОП ВО обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Modelling of nanodevices».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
ПК-2	Способен осуществлять моделирование принципиальных схем микроэлектромеханической системы и цифровых схем управления	Моделирование полупроводниковых наноструктур для информационных систем Научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской)	Научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской работы) Технологическая практика Преддипломная практика

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
		работы)	
ПК-8	Способен осуществлять подготовку технических решений по оптимизации технологического процесса изготовления микро- и наноразмерных электромеханических систем	Теоретическая механика Технология производства наноэлектронной базы/ Технология изготовления наноустройств Научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской работы)	Научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской работы) Технологическая практика Преддипломная практика

* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Modelling of nanodevices» составляет 4 зачетных единиц.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения ОП ВО для **ОЧНОЙ** формы обучения

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)
		6
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	72	72
в том числе:		
Лекции (ЛК)	36	36
Лабораторные работы (ЛР)	36	36
Практические/семинарские занятия (СЗ)		
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	45	45
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	27	27
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	144
	зач.ед.	4

Таблица 4.2. Виды учебной работы по периодам освоения ОП ВО для **ЗАОЧНОЙ** формы обучения*

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)
		5
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	12	12
в том числе:		
Лекции (ЛК)	6	6
Лабораторные работы (ЛР)	6	6
Практические/семинарские занятия (СЗ)		
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	123	123
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	9	9
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	144
	зач.ед.	4

* - заполняется в случае реализации программы в заочной форме

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
Topic 1. Density functional method (DFT).	Density functional method. The Van Vleck catastrophe: the nature of the "exponential well". Method Thomas-Fermi: an example of the density functional. Kohn-Hohenberg theorems. End Temperatures: Theory Mermin. Kohn-Shame ansatz equation. Variational Kohn-Hohenberg principle. The equation Kona-Sham. Local Density Approximation (LDA). Formalism of Kona-Shem. Exchange-correlation energy. Method for solving the Kohn-Sham equation. Temporary effects in the functional method density (TDDFT). Frenkel's variational principle. Density functional for non-stationary systems. Spin density functional. Density functional in the theory of superconductivity. quantum molecular dynamics. Comparison of Hartree-Fock and Kohn-Sham methods. Exchange-correlation functionals. Methods gradient correction. hybrid methods. Computational features of DFT methods. Calculation quality density functional methods.	ЛК
Topic 2. Practical lesson of the devices modelling	Calculations of atoms and simple molecules (4 hours). To master the WebMO interface and the logic of quantum chemical calculations in molecular and periodic versions, it is proposed to perform PBE / DFT calculations in the package Gaussian and VASP(ESPRESSO). For periodic calculations, a set of examples on the website https://www.vasp.at/wiki/index.php/Atoms_and_Molecules_-_Tutorial is used as a sample. The system is being considered. Calculation options: 1) at one point (for a given geometry), 2) calculation with geometry relaxation, 3) calculation of oscillation frequencies, 4) calculation in spin-polarized version. Preparing and reviewing solutions should be done in Chemcraft in parallel with WebMO.	ЛП
Topic 3. Software for quantum chemical calculations.	GAMESS, Gaussian, HyperChem, PRIRODA, WINMOPAC programs, Dalton and NWChem software packages. Interpreter programs for the results of quantum chemical calculations: ChemCraft, ViewMol3D, Molekel, Molden, GaussView. Program operation algorithms: methods, bases, functionals, properties, calculation parameters, areas of application.	ЛК
Topic 4. Practical lesson of the devices modelling	Calculations of 3D structures (4 hours). Do PBE/DFT calculations in batch VASP(ESPRESSO) for the bulk structure of a metal (oxide) with a face-centered lattice (for example, Si). Take geometry from databases (ICSD, Zeolite database) in the form CIF file. Examples of input files - on the site https://www.vasp.at/wiki/index.php/Bulk_Systems_-_Tutorial Run the calculation with fixed geometry, then with geometry relaxation. Visualize the results in the VESTA program. Surface calculations (4 hours). Perform calculation of metal surfaces in VASP program in the slab model with fixed geometry and surface relaxation. Sample input files - at	ЛП

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
	https://www.vasp.at/wiki/index.php/Surface_Science_-_Tutorial Individual tasks of choice (4 hours). Perform calculations of molecular systems (Gaussian) or periodic systems (VASP or ESPRESSO) optional.	

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	
Семинарская	Аудитория для проведения занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и техническими средствами мультимедиа презентаций.	
Компьютерный класс	Компьютерный класс для проведения занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная персональными компьютерами (в количестве ___шт.), доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	
Для самостоятельной работы обучающихся	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	

* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО!**

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.И. Барановский. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург: Лань, 2019. - 428 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/113631>
2. Chen, Jianhua, Zhenghe Xu, and Ye Chen. "Electronic structure and surfaces of sulfide minerals." *Density functional theory and applications* (2020): 181-236.
3. Демьянов, Александр, Николай Евсеев, and Олег Динариев. Основы метода функционала плотности в гидродинамике. Litres, 2022.

Дополнительная литература

1. Zhu, Chaoyuan, ed. *Time-Dependent Density Functional Theory: Nonadiabatic Molecular Dynamics*. CRC Press, 2022.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров:

Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН
<http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>

- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>
- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>
- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru
- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС «Троицкий мост»

2. Базы данных и поисковые системы:

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации <http://docs.cntd.ru/>
- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>
- поисковая система Google <https://www.google.ru/>
- реферативная база данных SCOPUS <http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля:*

1. Курс лекций по дисциплине «Modelling of nanodevices».

* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система* оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Modelling of nanodevices» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе

ДИСЦИПЛИНЫ.

* - ОМ и БРС формируются на основании требований соответствующего локального нормативного акта РУДН.

РАЗРАБОТЧИКИ:

**Доцент кафедры нанотехнологий и
микросистемной техники**

Должность, БУП



Подпись

А.И. Карцев

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

**Заведующий кафедрой
нанотехнологий и микросистемной
техники**

Наименование БУП



Подпись

С.В. Попов

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

**Доцент кафедры нанотехнологий и
микросистемной техники**

Должность, БУП



Подпись

М.О. Максеев

Фамилия И.О.