

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 31.05.2023 23:46:30
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 nanoobjects

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

28.04.01 Нанотехнологии и микросистемная техника

(код и наименование направления подготовки/специальности)

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

Инженерно-физические технологии в наноиндустрии (совместно с Евразийским национальным университетом им. Л.Н. Гумилева)

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

The objectives of the course are to introduce students to the fundamentals of the nanoobjects 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 nanoobjects» 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)
УК-7	Способен искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	УК-7.1 Знает основные цифровые технологии, методы поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации, применяемые в современных условиях цифровой экономики
		УК-7.2 Умеет искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными
		УК-7.3 Владеет современными цифровыми технологиями, методами оценки информации, ее достоверности, построения логических умозаключений на основании поступающих информации и данных
ОПК-5	Способен использовать инструментарий формализации инженерных, научно-технических задач, прикладное программное обеспечение для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов	ОПК-5.1 Знает основной инструментарий формализации инженерных, научно-технических задач, прикладное программное обеспечение для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов
		ОПК-5.2 Умеет использовать прикладное программное обеспечение для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов нанотехнологий и микросистемной техники
		ОПК-5.3 Владеет подходами для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов нанотехнологий и микросистемной техники
ПК-3	Готовность разрабатывать физические и математические модели, проводить компьютерное моделирование исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и микросистемной техники	ПК-3.1 Знаком с программным обеспечением для компьютерного моделирования исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и микросистемной техники
		ПК-3.2 Умеет разрабатывать физические и математические модели в области нанотехнологии и микросистемной техники

		ПК-3.3 Владеет навыками компьютерного моделирования исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и микросистемной техники
--	--	--

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Modelling of nanoobjects» относится к вариативной компоненте обязательной части блока Б1 ОП ВО.

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

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

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
УК-7	Способен искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	Основы применения нанотехнологий и микросистемной техники Технологии программирования в nanoиндустрии	Технологическая практика Преддипломная практика
ОПК-5	Способен использовать инструментарий формализации инженерных, научно-технических задач, прикладное программное обеспечение для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов	Введение в микро- и наноэлектромеханические системы Технологии программирования в nanoиндустрии	Научно-исследовательская работа Технологическая практика

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
ПК-3	Готовность разрабатывать физические и математические модели, проводить компьютерное моделирование исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и микросистемной техники	Технологии программирования в nanoиндустрии Квантовая механика в наносистемах	Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

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

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Modelling of nanoobjects» составляет 2 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)
		2
Контактная работа, ак.ч.	17	17
в том числе:		
Лекции (ЛК)		
Лабораторные работы (ЛР)	17	17
Практические/семинарские занятия (СЗ)		
Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.	55	55
Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.		
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	72
	зач.ед.	2

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

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

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
1. Initial concepts of the theory of multielectron systems	Wave function of a multielectron system. Symmetry of physical systems and types wave functions. The concept of space and spin orbitals. Single and multi-determinant functions. Full energy. The structure of the potential energy surface.	ЛК, ЛР
2. Self-consistent field equations	Energy of a one-determinant state. Closed and open shells. Variation of the total energy - the functional of the wave function. Method of indefinite Lagrange multipliers. Hartree-Fock equations. Expansion of orbitals in terms of basis functions. Base types. Rutan's equations. Population analysis. Block diagram of solutions of self-consistent field equations in quantum-chemical	ЛК, ЛР

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
	packages.	
3. Electron correlation	Post-Hartree-Fock approximations. Matrix of electron density of the 1st and 2nd order (correlation function). Correlation hole function. Energy as a functional of density matrices.	ЛК, ЛР
Density functional theory of Kohn-Sham	Electron density as a fundamental variable. The first and second Kohn-Sham theorems. Kohn-Sham equations.	ЛК, ЛР
Exchange-correlation functionals	Local density approximation. Gradient expansion. Generalized Gradient decomposition (GGA). Meta GGA. hybrid functionality. Orbital dependent functionals. DFT+U	ЛК, ЛР
Fundamentals of Solids Calculations	Bloch's theorem. Brillouin zones. symmetrical points. Density of states. Basis plane waves. Pseudopotentials. Method of attached plane waves. Structure of popular packages for periodic DFT calculations (VASP, ESPRESSO).	ЛК, ЛР

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, оснащенный персональными компьютерами (в количестве ___ шт.), доской	

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
	(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 nanoobjects».

* - 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 nanoobjects» 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
«Нанотехнологии и
микросистемная техника»

Наименование БУП



Подпись

С.В. Попов

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Доцент кафедры «Нанотехнологии
и микросистемная техника»

Должность, БУП



Подпись

С.В. Агасиева

Фамилия И.О.