

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 21.05.2026 16:33:14
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

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНООБЪЕКТОВ

(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):

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ ОПТО-, НАНО- И МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2026 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Моделирование нанообъектов» входит в программу магистратуры «Новые материалы и технологии опто-, нано- и микроэлектроники» по направлению 28.04.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника» и изучается во 2 семестре 1 курса. Дисциплину реализует Базовая кафедра «Нанотехнологии и микросистемная техника». Дисциплина состоит из 4 разделов и 8 тем и направлена на изучение метода функционала плотности и программных комплексов квантово химического моделирования для расчёта атомов, молекул и наноструктур.

Целью освоения дисциплины является сформировать навыки выбора функционалов и базисов, использования DFT пакетов и выполнения практических задач по моделированию нанообъектов и поверхностей.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Моделирование нанообъектов» 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	Способен разрабатывать физические и математические модели, проводить компьютерное моделирование исследуемых физических процессов в области	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;

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
	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 «Моделирование нанобъектов» относится к обязательной части блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Моделирование нанобъектов».

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; Информационные базы данных; 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 нанoeлектромеханические системы; Технологии программирования в nanoиндустрии;	Научно-исследовательская работа; Технологическая практика;
ПК-3	Способен разрабатывать физические и математические модели, проводить компьютерное моделирование исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и	Технологии программирования в nanoиндустрии; Квантовая механика в наносистемах;	Научно-исследовательская работа; Преддипломная практика;

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
	микросистемной техники		

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

** - элективные дисциплины /практики

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Моделирование нанообъектов» составляет «2» зачетные единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			2
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	17		17
Лекции (ЛК)	0		0
Лабораторные работы (ЛР)	17		17
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0		0
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	55		55
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	0		0
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	72	72
	зач.ед.	2	2

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

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

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
Раздел 1	Метод функционала плотности	1.1	Основные принципы DFT	Постановка задачи в методе функционала плотности, теоремы Хоэнберга–Кона и Мермина, уравнения Кона–Шэма и интерпретация одночастичных уровней.	ЛР
		1.2	Функционалы и приближения	Локальные, спин зависимые и градиентные функционалы, гибридные функционалы, оценка качества расчётов и выбор функционала для разных задач.	ЛР
Раздел 2	Практикум по моделированию простых систем	2.1	Расчёт атомов и малых молекул	Постановка и проведение расчётов атомов и простых молекул, анализ геометрии, энергий и зарядового распределения.	ЛР
		2.2	Сканирование потенциальных поверхностей	Построение сечений потенциала, определение переходных состояний и барьеров для элементарных процессов.	ЛР
Раздел 3	Программные пакеты квантово химических расчётов	3.1	Пакеты для расчётов и визуализации	Обзор программ GAMESS, Gaussian, HyperChem, PRIRODA, WINMOPAC, Dalton, NWChem и визуализаторов ChemCraft, ViewMol3D, Molekel, Molden, GaussView.	ЛР
		3.2	Настройка расчётов	Выбор методов, базисных наборов, функционалов и расчётных параметров для корректного моделирования нанообъектов.	ЛР
Раздел 4	Практикум по моделированию нанообъектов	4.1	3D структуры и поверхности	Расчёты трёхмерных наноструктур и поверхностей, получение энергетических и структурных характеристик.	ЛР
		4.2	Индивидуальные проекты по моделированию	Постановка и выполнение индивидуальных заданий по моделированию выбранных нанообъектов, подготовка отчётов и презентаций.	ЛР

* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – практические/семинарские занятия.

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)
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	Нет
Для самостоятельной работы	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	Нет

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

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Поленов Ю. В. Наноматериалы и нанотехнологии. Учебник. – СПб.: Лань, 2021.
2. Марголин В. И. и др. Введение в нанотехнологию. – СПб.: Лань, 2022.
3. Галочкин В. А. Введение в нанотехнологии и наноэлектронику. – М.: АСТ, 2023.
4. Зализняк В. Е., Золотов О. А. Математическое моделирование. – М.: Юрайт, 2026.
5. Горлач Б. А., Ефимов Е. А. Математическое моделирование. – СПб.: Лань, 2021.

Дополнительная литература:

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие / В.И. Барановский. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург: Лань, 2019. - 428 с
2. Chen, Jianhua, Zhenghe Xu, and Ye Chen. "Electronic structure and surfaces of sulfide minerals." Density functional theory and applications (2020): 181-236

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 <https://mega.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 «Знаниум» <https://znanium.ru/>
2. Базы данных и поисковые системы
 - Sage <https://journals.sagepub.com/>
 - Springer Nature Link <https://link.springer.com/>
 - Wiley Journal Database <https://onlinelibrary.wiley.com/>

- Наукометрическая база данных Lens.org <https://www.lens.org>
Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля:*

1. Курс лекций по дисциплине «Моделирование нанообъектов».

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

РАЗРАБОТЧИК:

Доцент

Должность, БУП

Подпись

Карцев Алексей Иванович

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Заведующий кафедрой

Должность БУП

Подпись

Попов Сергей Викторович

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Доцент

Должность, БУП

Подпись

Агасиева Светлана
Викторовна

Фамилия И.О.