

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Донецкий государственный университет»

Физико-технический факультет
Кафедра теоретической физики и нанотехнологий

УТВЕРЖДАЮ
проректор

_____ П. А. Машаров
«17» апреля 2025 г.
МП

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРО И НАНОСТРУКТУР

Укрупненная группа направлений подготовки	28.00.00 Нанотехнологии и наноматериалы
Программа высшего образования	Программа бакалавриата
Направление подготовки	28.03.03 Наноматериалы
Направленность (профиль) образовательной программы	Наноматериалы
Квалификация	Бакалавр
Форма обучения	Очная

Рабочая программа может быть адаптирована для лиц
с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

Донецк 2025

Рабочая программа дисциплины **«Моделирование микро и наноструктур»** для обучающихся по направлению подготовки 28.03.03 Наноматериалы (Профиль: Наноматериалы), составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки 28.03.03 Наноматериалы, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 22 сентября 2017 г. № 968 (с изм. и доп.), Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06 апреля 2021 г. № 245 (с изм. и доп.), в соответствии с учебным планом, утвержденным Ученым советом ФГБОУ ВО «ДонГУ» для набора 2025 года.

Разработчик:

профессор кафедры теоретической физики и
нанотехнологий,
д-р. физ.-мат. наук, с.н.с.

Л. С. Метлов

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий.

Протокол от 10.04.2025 г. № 18.

Заведующий кафедрой

А. Г. Петренко

СОГЛАСОВАНО:

И.о. декана физико-технического факультета
16.04.2025 г.

С. А. Фоменко

Учебно-методическая комиссия физико-технического факультета.

Протокол от 16.04.2025 г. № 4

Председатель

В. Н. Котенко

Руководитель основной образовательной
программы, д-р физ.-мат. наук, проф.
10.04.2025 г.

А. Г. Петренко

1. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

1.1. Требования к предварительной подготовке обучающихся, предшествующие и сопутствующие дисциплины, на которых основывается изучение данной:

дисциплины программы бакалавриата: Математический анализ, Механика и молекулярная физика, Методы анализа и контроля наноструктурированных материалов и систем.

1.2. Дисциплины, курсовые работы и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее:

Производственная практика: преддипломная практика.

2. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1. Общая характеристика

Наименование показателя	Значение показателя
Название образовательной программы (далее – ОП)	28.03.03 Наноматериалы (Профиль: Наноматериалы)
Шифр и название в соответствии с учебным планом	Б1.В.ОД.6 Моделирование микро и наноструктур
Часть образовательной программы	Вариативная часть: выбор вуза
Количество зачетных единиц / всего часов	3 / 108

В случае предъявления от обучающегося или его родителя (законного представителя) заявления на обучение по адаптированной образовательной программе высшего образования, подкрепленного заключением психолого-медико-педагогической комиссии (ПМПК) или медико-социальной экспертизы (МСЭ) с рекомендациями создания индивидуальной программы реабилитации и абилитации (ИПРА), данная рабочая программа может быть адаптирована с учетом индивидуальных особенностей здоровья обучающегося.

2.2. Распределение часов по формам и периодам обучения

Форма обучения	курс	семестр	Общее количество часов					Форма контроля
			лекционных	лабораторных	практических	самостоятельной работы + контроль	всего	
Очная	4	8	20	-	40	48	108	зачет

3. ЦЕЛИ ДИСЦИПЛИНЫ

Формирование у студентов знаний по современным программам моделирования и проектирования наноструктур.

4. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ КОМПОНЕНТА ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ, ИХ ИНДИКАТОРЫ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Компетенции	Индикаторы	Результаты обучения
-------------	------------	---------------------

ПК-1. Способен апробировать новые методики с согласованием полученных результатов с результатами стандартных методик	ПК-1.5. Применяет методы моделирования для анализа экспериментальных исследований	ПК-1.5.1. Знает экспериментальные методы исследования наносистем ПК-1.5.2. Умеет использовать различные программные пакеты для моделирования наноструктур ПК-1.5.3. Владеет различными методами моделирования наноструктур
	ПК-1.6. Участвует в проведении экспериментальных исследований с помощью методов моделирования наноструктур	ПК-1.6.1. Знает методы моделирования наноструктур ПК-1.6.2. Умеет выбирать подходящую модель для каждого вида исследуемого материала и требуемого результата ПК-1.6.3. Владеет навыками в использовании специальных программных пакетов для моделирования наноструктур

5. ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Название темы	Краткое содержание темы (вопросы темы)
Раздел 1. Введение в компьютерное моделирование наноструктур	
Введение в компьютерное моделирование	Часть 1. Понятие моделирования. Выбор модели. Области применения. Эмпирические модели. Модели из первых принципов. Наноструктуры. Особенности моделирования наноструктур. Точные и приближенные решения. Часть 2. Компьютерное моделирование. Роль компьютеров. Вычислительные методы. Виды компьютеров. Роль юникс-подобных операционных систем в моделировании..
Квантовомеханические и классические модели	Часть 1. Модели, основанные на классической механике. Области применения. Положительные и отрицательные стороны. Часть 2. Модели, основанные на квантовой теории. Области применения. Преимущества перед классическими методами. Недостатки моделей.
Основные методы	Часть 1. Основы квантовомеханического представления. Квантование. Уравнение Шредингера. Часть 2. Кристаллические тела. Решетки Браве. Базис. Прямое и обратное пространства. Закон дисперсии. Наноструктуры. Часть 3. Метод молекулярной динамики. Области применения. Особенности реализации на суперкомпьютерах. Часть 4. Метод самосогласованного поля. Часть 5. Метод эмпирического псевдопотенциала.

	<p>Часть 6. Теория функционала электронной плотности.</p> <p>Часть 7. Модель сильной связи.</p> <p>Часть 8. Особенности моделирования наноструктур. Метод сверхячейки. Модель складывания зоны.</p> <p>Вычислительные средства.</p>
Вычислительные средства.	<p>Часть 1. Виды вычислительных средств. Персональные компьютеры. Портативные компьютеры. Высокопроизводительные компьютеры. Вычислительные средства, на основе графических процессоров. Кластерная и симметричная мультипроцессорность. Параллельные вычисления. Преимущества и недостатки различных решений.</p> <p>Часть 2. Использование юникс-подобных операционных систем. Основы работы. Удаленное управление. Установка, компиляция и запуск расчетных задач. Особенности работы на кластерных суперкомпьютерах.</p>
Раздел 2. Программные продукты для моделирования наносистем	
Программные продукты для моделирования наносистем.	<p>Часть 1. Обзор программных пакетов, используемых для расчета и проектирования наносистем.</p> <p>Часть 2. Программный комплекс Avogadro. Конструирование наносистем. Оптимизация геометрий. Экспорт и импорт данных в другие системы.</p> <p>Часть 3. Программный пакет с открытым исходным кодом PWSCF. Теоретические основы. Основные возможности пакета.</p>
Экспериментальные методы исследования наносистем	<p>Часть 1. Обзор основных методов исследования.</p> <p>Часть 2. Спектроскопия оптического поглощения</p> <p>Часть 3. Фотолюминесцентная спектроскопии</p> <p>Часть 4. Спектроскопия комбинационного рассеяния света</p> <p>Часть 5. Электронная микроскопия</p>

6. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Форма обучения – очная, курс – 4, семестр – 8

Наименования разделов и тем	Количество часов				
	Лекц.	Лабор.	Практ.	СРС+К	Всего
Раздел 1. Введение в компьютерное моделирование наноструктур	14		28	32	74
Введение в компьютерное моделирование	3		6	8	17

Квантовомеханические и классические модели	3		6	8	17
Основные методы	4		8	8	20
Вычислительные средства.	4		8	8	20
Раздел 2. Программные продукты для моделирования наносистем	6		12	16	34
Программные продукты для моделирования наносистем.	3		6	8	17
Экспериментальные методы исследования наносистем	3		6	8	17
ИТОГО ПО КОМПОНЕНТУ ОПОП	20	—	40	48	108

7. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ (СРЕДСТВА) ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

7.1. Контрольные вопросы

Раздел 1

1. Понятие моделирования. Выбор модели. Области применения.
2. Эмпирические модели.
3. Модели из первых принципов.
4. Наноструктуры. Особенности моделирования наноструктур. Точные и приближенные решения.
5. Компьютерное моделирование. Роль компьютеров.
6. Вычислительные методы.
7. Роль юникс-подобных операционных систем в моделировании..
8. Модели, основанные на классической механике. Области применения. Положительные и отрицательные стороны.
9. Модели, основанные на квантовой теории. Области применения.
10. Преимущества моделей, основанных на квантовой теории перед классическими методами. Недостатки моделей.

Раздел 2

11. Основы квантовомеханического представления. Квантование.
12. Уравнение Шредингера.
13. Кристаллические тела. Решетки Браве. Базис. Прямое и обратное пространства. Закон дисперсии.
14. Наноструктуры.
15. Метод молекулярной динамики. Области применения. Особенности реализации на суперкомпьютерах.

7.2. Темы письменных работ (типы задач)

- Основы квантовомеханического представления. Квантование.
- Уравнение Шредингера.
- Кристаллические тела. Решетки Браве. Базис.
- Прямое и обратное пространства. Закон дисперсии. Наноструктуры.
- Метод молекулярной динамики. Области применения.
- Особенности реализации на суперкомпьютерах.
- Метод самосогласованного поля.
- Метод эмпирического псевдопотенциала.
- Модель сильной связи.
- Особенности моделирования наноструктур. Метод сверхячейки. Модель складывания зоны.

Контрольная работа по проверке теоретических знаний – по всем темам, с использованием указанных выше контрольных вопросов.

8. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БАЛЛОВ, КОТОРЫЕ ПОЛУЧАЮТ ОБУЧАЮЩИЕСЯ

Общая оценка знаний обучающихся по дисциплине проводится по 100-балльной шкале исходя из максимума, приведенного в таблице ниже.

Организационно-учебная работа в аудитории оценивается на основе таких критериев как посещаемость занятий, своевременное и качественное выполнение домашних заданий, активность во время проведения лекционных и практических занятий (участие в обсуждении текущего и пройденного материала, решение задач и т.п.).

Самостоятельная работа оценивается на основе предоставленных на проверку выполненных домашних, индивидуальных заданий с учетом своевременности их предоставления и соответствия требованиям к их выполнению.

Количество баллов за контрольную работу вычисляется как сумма баллов за все входящие в её состав задания. Каждое задание оценивается исходя из максимально возможного количества баллов с учетом правильности выполнения задания, полноты приводимых обоснований.

По результатам работы в семестре обучающийся, набравший не менее 60 баллов, имеет право получить оценку. Те, кто претендует на более высокий балл, проходят промежуточную аттестацию. Максимальное количество баллов на промежуточной аттестации – 100. Общее количество баллов за семестр вычисляется как максимальная из полученных за семестр и на промежуточной аттестации и выставляется согласно принятому порядку.

8.1. Семестр 8

Номера разделов	Виды работ	Максимальное количество баллов
1-2	Организационно-учебная работа в аудитории	20
	Самостоятельная работа	10
	Контрольные работы по практике	10
	Контрольная работа по теоретическому материалу	20
ИТОГО		60
Промежуточная аттестация (зачет)		40
Общий итог за семестр		100

Соответствие баллов оценке

Количество баллов из 100	ECTS	Оценка по пятибалльной шкале	
		Экзамен, дифференцированный зачет	Зачет
90-100	A	отлично	зачтено
80-89	B	хорошо	зачтено
75-79	C		зачтено
70-74	D	удовлетворительно	зачтено
60-69	E		зачтено
35-59	FX	неудовлетворительно	не зачтено
0-34	F		не зачтено

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Учебные занятия проводятся в 4 учебном корпусе ДонГУ (г. Донецк, пр. Театральный, 13). Для проведения занятий требуется аудитория, оборудованная меловой или маркерной доской, мультимедийный проектор и экран, ноутбук, комплект учебной мебели для студентов, рабочее место преподавателя, выход в Интернет – проводной или с использованием Wi-Fi.

Для самостоятельной работы используются текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета и других электронных библиотечных баз данных, учебно-методическое обеспечение, представленное в учебно-методическом кабинете кафедры теоретической физики и нанотехнологий(ауд.256).

Обучающиеся имеют возможность использовать учебные материалы по дисциплине, размещенные на платформе Moodle Центра дистанционного образования ФГБОУ ВО «ДонГУ». При изучении дисциплины могут применяться электронное обучение и дистанционные образовательные технологии.

С использованием ресурсов платформы дистанционного образования осуществляется текущий контроль знаний обучающихся на основе тестирования и проверки результатов самостоятельной работы.

10. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

10.1. Основная литература

1. Компьютерное моделирование в физике : [в 2 ч.]. Ч. 1 / Х. Гулд, Я. Тобочник; пер. с англ. А. Н. Полюдова, В. А. Панченко. - М. : Мир, 1990. - 349 с.
2. Компьютерное моделирование в физике : [в 2 ч.]. Ч. 2 / Х. Гулд, Я. Тобочник; пер. с англ. А. Н. Полюдова, В. А. Панченко. - М. : Мир, 1990. - 399.
3. Вычислительные методы и системы обработки данных на ЭВМ : сб. тр. Н.-и. ВЦ МГУ / под ред. В. А. Морозова, В. М. Репина. - Москва : Изд-во МГУ, 1988. - 190 с.
4. Варюхин, В. Н. Наноматериалы [Электронный ресурс] : [учеб. пособие] / В. Н. Варюхин, С. В. Терехов ; Донецкий нац. ун-т ; Донецкий физ.-техн. ин-т им. А. А. Галкина. - Донецк : ДонНУ, 2016. - Электронные данные (1 файл).

10.2. Дополнительная литература

1. Терехов С. В. Физика нанобъектов: [учебное пособие] / С. В. Терехов, В. Н. Варюхин; ГОУ ВПО «ДонНУ» - Донецк: ДонНУ, 2013. – 418 с.
2. Нанотехнологии и специальные материалы: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по направлению подготовки 140140 - Техн. физика / Ю. П. Солнцев, Е. И. Пряхин, С. А. Вологжанина, А. П. Петкова ; под ред. Ю. П. Солнцева. - Санкт-Петербург: Химиздат, 2009. – 334, [1] с.

11. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. **Национальная электронная библиотека (НЭБ):** федеральная государственная информационная система / Министерство Культуры РФ; Российская государственная библиотека. – Москва, 2019- . – URL: <https://rusneb.ru/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: свободный, подписка. Необходима установка программного обеспечения. – Текст: электронный.
2. **eLIBRARY.RU:** научная электронная библиотека: сайт. – Москва, 2000- . – URL: <https://elibrary.ru> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: для авторизов. пользователей. –Текст: электронный.
3. Научная электронная библиотека «КиберЛенинка»: сайт / Ассоциация «Открытая наука». – Москва, 2014- . – URL: <https://cyberleninka.ru/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.

4. Электронно-библиотечная система «Лань»: [сайт]. – URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: издания Сетевой электронной библиотеки, для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.
5. ЭБС Юрайт: электронная библиотечная система: сайт. – Москва, 2013. – URL: <https://urait.ru/library/svobodnyy-dostup/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: издания свободного доступа, для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.
6. Электронно-библиотечная система ДонГУ: сайт / ФГБОУ ВО «ДонГУ». – Донецк, 2016- . – URL: <http://library.donnu.ru/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.
7. Электронный каталог Научной библиотеки ДонГУ: раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://library.donnu.ru/catalog/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: поиск свободный, электронные документы – для пользователей ДонГУ.
8. Электронный архив ДонГУ: раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://repo.donnu.ru/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: свободный.

12. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонГУ № 46484614)
2. Microsoft Office (корпоративная лицензия ДонГУ № 46472919)
3. Microsoft Visual Studio (лицензия программы Dream Spark для высших учебных заведений)
4. Антивирус Касперского, Adobe Acrobat Reader, xPDF (лицензии GPL, Apache, BSD для свободного программного обеспечения).