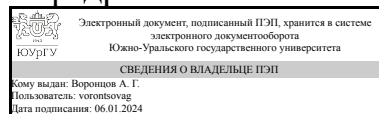


УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий выпускающей  
кафедрой



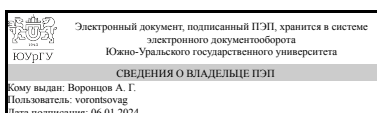
А. Г. Воронцов

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

**дисциплины 1.Ф.М0.08.01 Атомистическое моделирование материалов нанoeлектроники**  
**для направления 11.04.04 Электроника и нанoeлектроника**  
**уровень Магистратура**  
**магистерская программа Нанoeлектроника: квантовые технологии и материалы**  
**форма обучения очная**  
**кафедра-разработчик Физика наноразмерных систем**

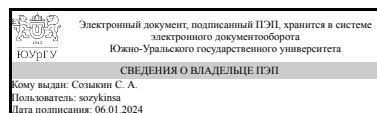
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 11.04.04 Электроника и нанoeлектроника, утверждённым приказом Минобрнауки от 22.09.2017 № 959

Зав.кафедрой разработчика,  
д.физ.-мат.н., доц.



А. Г. Воронцов

Разработчик программы,  
к.физ.-мат.н., доц., доцент



С. А. Созыкин

## 1. Цели и задачи дисциплины

Цель дисциплины – познакомить студентов в теории и на практике с современными методами атомистического моделирования материалов, применяемых в наноэлектронике (металлы и полупроводники). Задачи дисциплины: дать навык использования прикладного научного ПО, включая препроцессинг входных данных и постпроцессинг результатов моделирования; дать представление о теоретических основах используемых в таком ПО методов.

## Краткое содержание дисциплины

Курс «Атомистическое моделирование материалов наноэлектроники» читается студентам на втором семестре магистратуры. Этот курс дает обзор современных методов атомистического моделирования, использующихся для понимания и предсказания свойств материалов, использующихся в наноэлектронике. Упор в курсе делается на практическое использование современных техник, алгоритмов и программных пакетов, использующихся при дизайне материалов, начиная с теории и заканчивая инженерией. Практические занятия позволят студентам наработать практический опыт работы с пакетами, включая подготовку расчетов, их запуск и интерпретацию их результатов. Идеи многомасштабного моделирования, затронутые в курсе, позволят продемонстрировать потенциал применения обсуждаемых методов к различным областям индустрии будущего, включая нанотехнологии, электронику и возобновляемую энергетику.

## 2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

| Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)  | Планируемые результаты обучения по дисциплине   |
|--|---|
| ПК-2 Способен разрабатывать эффективные алгоритмы решения сформулированных задач с использованием современных языков программирования и обеспечивать их программную реализацию | Знает: Современные методы моделирования структуры и свойств материалов<br>Умеет: Использовать современные программные пакеты для моделирования свойств интересующих материалов<br>Имеет практический опыт: Применения современных методов моделирования для решения конкретных практических задач |

## 3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

| Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана | Перечень последующих дисциплин, видов работ  |
|---|--|
| Нет   | Квантово-статистические методы наноэлектроники,<br>Микропроцессорные системы,<br>Физика наноразмерных систем,<br>Электроника структур пониженной размерности,<br>Производственная практика (научно-исследовательская работа) (3 семестр) |

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Нет

#### 4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 ч., 56,5 ч. контактной работы

| Вид учебной работы   | Всего часов | Распределение по семестрам в часах |  |
|--|-------------|------------------------------------|--|
|  |             | Номер семестра                     |  |
|  |             | 2                                  |  |
| Общая трудоёмкость дисциплины  | 144         | 144                                |  |
| <i>Аудиторные занятия:</i>   | 48          | 48                                 |  |
| Лекции (Л)   | 16          | 16                                 |  |
| Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ) | 32          | 32                                 |  |
| Лабораторные работы (ЛР)   | 0           | 0                                  |  |
| <i>Самостоятельная работа (СРС)</i>  | 87,5        | 87,5                               |  |
| Подготовка к контрольным мероприятиям                                      | 78          | 78                                 |  |
| Подготовка к экзамену  | 9,5         | 9,5                                |  |
| Консультации и промежуточная аттестация                                    | 8,5         | 8,5                                |  |
| Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)                                   | -           | диф.зачет                          |  |

#### 5. Содержание дисциплины

| № раздела | Наименование разделов дисциплины   | Объем аудиторных занятий по видам в часах |   |    |    |
|-----------|--|---|---|----|----|
|           |  | Всего                                     | Л | ПЗ | ЛР |
| 1         | Квантовая механика. Метод Хартри-Фока  | 8   | 4 | 4  | 0  |
| 2         | Теория функционала электронной плотности (ТФП)                                     | 16  | 4 | 12 | 0  |
| 3         | Описание сильно коррелированных систем. Расширение ТФП, пост-Хартри-Фоковые методы | 24  | 8 | 16 | 0  |

##### 5.1. Лекции

| № лекции | № раздела | Наименование или краткое содержание лекционного занятия  | Кол-во часов |
|----------|-----------|--|--------------|
| 1        | 1         | Введение в предмет. Квантовая механика. Уравнение Шредингера. Решение уравнения для атома водорода | 2            |
| 2        | 1         | Решение уравнения Шредингера для многих частиц. Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод Хартри-Фока. | 2            |
| 3        | 2         | Теория функционала электронной плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона. Уравнение Кона-Шэма.             | 2            |
| 4        | 2         | Численное решение уравнений Кона-Шэма. Базисы разложения волновых                                  | 2            |

|   |   |  |   |
|---|---|--|---|
|   |   | функций. Приближения для обменно-корреляционного взаимодействия.   |   |
| 5 | 3 | Интегрирование по зоне Бриллюэна. Псевдопотенциалы. Проблемы ТФП. Гибридные функционалы. ТФП+U.  | 2 |
| 6 | 3 | Динамика решетки: фононы и магноны. Формализм функций Грина. Спектры возбуждения и оптические свойства материалов. Зависящая от времени ТФП (TDDFT).   | 2 |
| 7 | 3 | Введение в моделирование поверхностей, интерфейсов и низкоразмерных систем. Поверхностные электронные состояния: состояния Тамма, состояния Шокли. Поверхностные состояния на полупроводниках. | 2 |
| 8 | 3 | Описание электронов, локализованных в пространстве. Функции Ванье. Молекулярные орбитали. Химическая связь.  | 2 |

## 5.2. Практические занятия, семинары

| № занятия | № раздела | Наименование или краткое содержание практического занятия, семинара   | Кол-во часов |
|-----------|-----------|---|--------------|
| 1         | 1         | Работа в командной строке Linux. Установка и настройка ПО Quantum Espresso.                                     | 4            |
| 2         | 2         | Моделирование уравнения состояния Бирча-Мурнагана для простых металлов с использованием ПО Quantum Espresso.    | 4            |
| 3         | 2         | Моделирование упругих свойств   | 4            |
| 4         | 2         | Моделирование плотности электронных состояний и зонной структуры  | 4            |
| 5         | 3         | Моделирование материалов с использованием различных функционалов (DFT+U, гибридные функционалы, ван-дер-Ваальс) | 4            |
| 6         | 3         | Моделирование фононных спектров и зонной структуры фононов  | 4            |
| 7         | 3         | Моделирование электронной структуры низкоразмерных систем   | 4            |
| 8         | 3         | Моделирование транспортных свойств материалов с использованием функций Ванье                                    | 4            |

## 5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

## 5.4. Самостоятельная работа студента

| Выполнение СРС                        |  |         |              |
|---------------------------------------|--|---------|--------------|
| Подвид СРС                            | Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс                 | Семестр | Кол-во часов |
| Подготовка к контрольным мероприятиям | Воронцов и др, гл.1, гл. 2 (в части практических упражнений), Ибрагимов и др., гл. 2, 3, 8 | 2       | 78           |
| Подготовка к экзамену                 | Воронцов и др, гл.1, гл. 2 (в части практических упражнений), Ибрагимов и др., гл. 2, 3, 8 | 2       | 9,5          |

## 6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

### 6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

| № КМ | Се-местр | Вид контроля     | Название контрольного мероприятия               | Вес | Макс. балл | Порядок начисления баллов   | Учи-тыва-ется в ПА       |
|------|----------|------------------|---|-----|------------|---|--------------------------|
| 1    | 2        | Текущий контроль | Работа 1. Знакомство с пакетом Quantum ESPRESSO | 1   | 5          | В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл | дифференцированный зачет |
| 2    | 2        | Текущий контроль | Работа 2. Уравнение состояния                   | 1   | 5          | В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл | дифференцированный зачет |
| 3    | 2        | Текущий контроль | Работа 3. Оптимизация структуры                 | 1   | 5          | В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах                           | дифференцированный зачет |

|   |   |                  |   |   |   |   |                          |
|---|---|------------------|---|---|---|---|--------------------------|
|   |   |                  |   |   |   | налагается штраф в 1 балл   |                          |
| 4 | 2 | Текущий контроль | Работа 4. Электронная структура           | 1 | 5 | В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл | дифференцированный зачет |
| 5 | 2 | Текущий контроль | Работа 5. Плотность электронных состояний | 1 | 5 | В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл | дифференцированный зачет |
| 6 | 2 | Текущий контроль | Работа 6. DFT+U                           | 1 | 5 | В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл | дифференцированный зачет |
| 7 | 2 | Текущий контроль | Работа 7. Фононный спектр                 | 1 | 5 | В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых   | дифференцированный зачет |

|    |   |                          |   |   |    |  |                          |
|----|---|--------------------------|---|---|----|--|--------------------------|
|    |   |                          |   |   |    | величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл  |                          |
| 8  | 2 | Текущий контроль         | Работа 8. Расчет локализованных атомных орбиталей | 1 | 5  | В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должны быть входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл  | дифференцированный зачет |
| 9  | 2 | Текущий контроль         | Работа на занятиях                                | 2 | 10 | Балл за задание складывается из посещаемости занятий и наличия конспектов лекций. За наличие конспекта всех лекций, отражающего основное содержание курса, выставляется 5 баллов. В случае отсутствия или слишком поверхностного изложения материала одной или более лекций балл за конспект не выставляется. Балл за посещаемость выставляется равным 5 баллов умноженным на процент посещенных занятий за семестр. | дифференцированный зачет |
| 10 | 2 | Промежуточная аттестация | Дифференцированный зачет                          | - | 40 | На экзамене студенту предлагается один теоретический и один практический вопрос. Полный и  | дифференцированный зачет |

|  |  |  |  |  |   |  |
|--|--|--|--|--|---|--|
|  |  |  |  |  | правильный ответ на теоретический вопрос оценивается в 15 баллов, полный и правильный ответ на практический вопрос (входные файлы для расчета требуемых величин, результат или график и выводы) оценивается в 25 баллов. За каждую ошибку в ответе налагается штраф в 3 балла. Полностью отсутствующий / неверный ответ оценивается в 0 баллов. |  |
|--|--|--|--|--|---|--|

## 6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

| Вид промежуточной аттестации | Процедура проведения   | Критерии оценивания                     |
|------------------------------|--|---|
| дифференцированный зачет     | <p>Прохождение контрольного мероприятия промежуточной аттестации не является обязательным для студентов. Студент может пройти контрольное мероприятие промежуточной аттестации для повышения своего рейтинга. Промежуточная аттестация проводится в письменной форме и на компьютерах.</p> <p>Продолжительность экзамена - 2 часа, после 30 минут экзамена экзаменатор собирает и оценивает ответ на теоретический вопрос. Ответ на практический вопрос (входные и выходные файлы программы, величины и графики) оценивается в конце экзамена, при этом студенту могут быть заданы несколько дополнительных вопросов по ответу для проверки понимания ими материала.</p> | В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения |

## 6.3. Паспорт фонда оценочных средств

| Компетенции | Результаты обучения   | № КМ |   |   |   |   |   |   |   |   |    |
|-------------|---|------|---|---|---|---|---|---|---|---|----|
|             |   | 1    | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
| ПК-2        | Знает: Современные методы моделирования структуры и свойств материалов  | +    | + | + | + | + | + | + | + | + | +  |
| ПК-2        | Умеет: Использовать современные программные пакеты для моделирования свойств интересующих материалов            | +    | + | + | + | + | + | + | + | + | +  |
| ПК-2        | Имеет практический опыт: Применения современных методов моделирования для решения конкретных практических задач | +    | + | + | + | + | + | + | + | + | +  |

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины



## Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

Не предусмотрена

б) дополнительная литература:

Не предусмотрена

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

Не предусмотрены

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Воронцов, А. Г. Компьютерные методы моделирования материалов [Текст] учеб. пособие для аспирантов направлений "Физика и астрономия" и "Физ. химия" А. Г. Воронцов, А. Н. Соболев, С. А. Созыкин ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Компьютер. моделирование и нанотехнологии ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2018. - 120, [1] с. электрон. версия

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Воронцов, А. Г. Компьютерные методы моделирования материалов [Текст] учеб. пособие для аспирантов направлений "Физика и астрономия" и "Физ. химия" А. Г. Воронцов, А. Н. Соболев, С. А. Созыкин ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Компьютер. моделирование и нанотехнологии ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2018. - 120, [1] с. электрон. версия

## Электронная учебно-методическая документация

| № | Вид литературы            | Наименование ресурса в электронной форме          | Библиографическое описание   |
|---|---------------------------|---|--|
| 1 | Дополнительная литература | Электронно-библиотечная система издательства Лань | Прудников, В. В. Квантово-статистическая теория твердых тел : учебное пособие / В. В. Прудников, П. В. Прудников, М. В. Мамонова. — 2-е изд., доп. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 448 с. — ISBN 978-5-8114-2061-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/168909">https://e.lanbook.com/book/168909</a> (дата обращения: 11.01.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей. |
| 2 | Основная литература       | Электронно-библиотечная система издательства Лань | Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 384 с. — ISBN 978-5-8114-1032-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/167744">https://e.lanbook.com/book/167744</a> (дата обращения: 11.01.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.                   |

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Canonical Ltd.-Ubuntu(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -The Cambridge Cristallographic Data Centre(31.12.2023)

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

| Вид занятий                     | № ауд.     | Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий |
|---------------------------------|------------|--|
| Практические занятия и семинары | 463<br>(1) | Компьютеры с предустановленной ОС Ubuntu   |