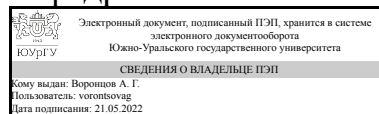


УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий выпускающей  
кафедрой



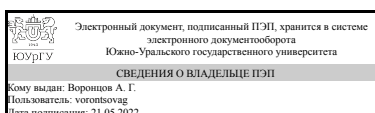
А. Г. Воронцов

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

**дисциплины 1.Ф.М1.09.01** Атомистическое моделирование материалов  
наноэлектроники  
**для направления 11.04.04** Электроника и наноэлектроника  
**уровень** Магистратура  
**магистерская программа** Наноэлектроника: квантовые технологии и материалы  
**форма обучения** очная  
**кафедра-разработчик** Физика наноразмерных систем

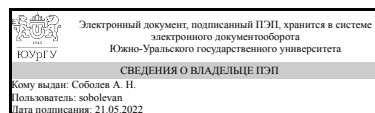
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 11.04.04 Электроника и наноэлектроника, утверждённым приказом Минобрнауки от 22.09.2017 № 959

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



А. Г. Воронцов

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



А. Н. Соболев

## 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 Умеет: Использовать современные программные пакеты для моделирования свойств интересующих материалов 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	Физика наноразмерных систем, Электроника структур пониженной размерности, Квантово-статистические методы наноэлектроники, Микропроцессорные системы, 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., 58,5 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>	85,5	85,5	
с применением дистанционных образовательных технологий	0		
Подготовка к экзамену	7,5	7,5	
Подготовка к контрольным мероприятиям	78	78	
Консультации и промежуточная аттестация	10,5	10,5	
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен	

#### 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.	2

		Уравнение Кона-Шэма.	
4	2	Численное решение уравнений Кона-Шэма. Базисы разложения волновых функций. Приближения для обменно-корреляционного взаимодействия.	2
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 экзамену	Воронцов и др, гл.1, гл. 2 (в части практических упражнений), Ибрагимов и др., гл. 2, 3, 8	2	7,5
Подготовка к контрольным мероприятиям	Воронцов и др, гл.1, гл. 2 (в части практических упражнений), Ибрагимов и др., гл. 2, 3, 8	2	78

## 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	Учитывается в ПА
1	2	Текущий контроль	Проверка правильности установки QE	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	экзамен
2	2	Текущий контроль	Уравнение состояния Берча-Мурнагана	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	экзамен
3	2	Текущий контроль	Расчет объемного модуля	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	экзамен
4	2	Текущий контроль	Расчет электронной 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 налагается штраф в 1 балл	экзамен
5	2	Текущий контроль	Моделирование методом 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	экзамен
6	2	Текущий контроль	Расчет фоновых спектров	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	экзамен

						верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	
7	2	Текущий контроль	Моделирование поверхностей	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	экзамен
8	2	Текущий контроль	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	экзамен
9	2	Бонус	Бонусные баллы	-	15	Студенту могут быть поставлены бонусные баллы за наличие конспекта лекций. Максимальный балл ставится за наличие всех лекций, отсутствие каждой лекции налагает штраф в 3 балла, 0 баллов ставится за отсутствие 5 лекций и более.	экзамен
10	2	Промежуточная аттестация	Экзамен	-	40	На экзамене студенту предлагается один теоретический и один практический вопрос. Полный и 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.	экзамен

## 6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
экзамен	Прохождение экзамена не является обязательным для студентов. Экзамен проводится в письменной форме и на компьютерах. 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.	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. -Thr Cambridge Cristallographic Data Centre(бессрочно)

## 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 (1)	Компьютеры с предустановленной ОС Ubuntu