ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Институт естественных и точных наук

ЮУрГУ
Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе электронного документооборота Южно-Уральского государственного университета
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Замышляева А. А.
Пользователь: zamyshliaevaaa
Дата подписания: 23.01.2022

А. А. Замышляева

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.

ЮУрГУ
Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе электронного документооборота Южно-Уральского государственного университета
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Воронцов А. Г.
Пользователь: vorontsovag
Дата подписания: 17.01.2022

А. Г. Воронцов

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

ЮУрГУ
Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе электронного документооборота Южно-Уральского государственного университета
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Соболев А. Н.
Пользователь: sobolevan
Дата подписания: 17.01.2022

А. Н. Соболев

СОГЛАСОВАНО

Руководитель образовательной программы
д.физ.-мат.н., проф.

ЮУрГУ
Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе электронного документооборота Южно-Уральского государственного университета
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Мирзоев А. А.
Пользователь: mirzoevaa
Дата подписания: 17.01.2022

А. А. Мирзоев

Челябинск

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 своременных 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, Микропроцессорные системы, Электроника структур пониженной размерности, Физика наноразмерных систем, 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
Аудиторные занятия:	48	48
Лекции (Л)	16	16
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	32	32
Лабораторные работы (ЛР)	0	0
Самостоятельная работа (СРС)	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. Текущий контроль успеваемости, промежуточная аттестация

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	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 фононных 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 остутствие 5 лекций и более.	экзамен
10	2	Проме-жуточная 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 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. Оценочные материалы

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 своременных методов моделирования для решения конкретных практических задач	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

Фонды оценочных средств по каждому контрольному 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: https://e.lanbook.com/book/168909 (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: https://e.lanbook.com/book/167744 (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