

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФИЗИКО - ТЕХНИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра теоретической физики и нанотехнологий



УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по научно-методической
и учебной работе

Е.И. Скафа Е.И. Скафа

апреля 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Моделирование микро и нано структур

Направление подготовки:	28.03.03 Наноматериалы
Профиль подготовки:	
Образовательная программа:	бакалавриат
Квалификация:	академический бакалавр
Форма обучения:	<u>очная</u> , очно-заочная, <u>заочная</u>

Донецк 2020

УТВЕРЖДАЮ:

Декан физико-технического факультета

С.А.Фоменко



«17» апреля 2020 г.

Программа учебной дисциплины «Моделирование микро и нано структур» составлена на основании Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования (ГОС ВПО) Донецкой Народной Республики (ДНР) по направлению подготовки 28.03.03 Наноматериалы, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР от 28 сентября 2016 г. № 987; Порядка организации учебного процесса в образовательных организациях высшего профессионального образования Донецкой Народной Республики, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР № 1171 от «10» ноября 2017 г.; учебного плана и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 28.03.03 Наноматериалы, разработанных в ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет».

Разработчик:

Профессор кафедры
теоретической физики и нанотехнологий

В.В. Румянцев

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий

Протокол №15 от «02» апреля 2020 г.

Заведующий кафедрой

В.Н.Варюхин

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией физико-технического факультета

Протокол № 5 от «15» апреля 2020 г.

Председатель учебно-методической
комиссии факультета

В.Н.Котенко

1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

«Моделирование микро и нано структур» является дисциплиной вариативной части Профессионального Блока по направлению подготовки 28.03.03 Наноматериалы. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, сформированные в процессе изучения предметов «Дифференциальные уравнения», «Аналитическая геометрия и линейная алгебра», «Основы процессов микро и нанотехнологий», «Материаловедение наноструктурированных материалов», «Квантовая механика» на предыдущем уровне образования. Полученные знания используются студентами во время выполнения учебной и производственной практики, при написании выпускной квалификационной работы.

2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

<i>Характеристика учебной дисциплины</i>		
Направление подготовки	28.03.03 Наноматериалы	
Профиль		
Образовательная программа	бакалавриат	
Квалификация	академический бакалавр	
Количество содержательных модулей	2	
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	дисциплина вариативной части	
Формы контроля (МК, экзамен, зачет)	МК, зачет	
Показатели	очная форма обучения	заочная форма обучения
Количество зачетных единиц (кредитов)	4	4
Год подготовки	4	4
Семестр	8	
Количество часов	144	144
- лекционных	20	4
- практических, семинарских	40	8
- лабораторных		
- самостоятельной работы	84	132
в т.ч. индивидуальное задание		
Недельное количество часов,	6	12
в т.ч. аудиторных	6	12

3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели и задачи

Цель - расширение научного кругозора и эрудиции студентов на базе изучения современных программ моделирования и проектирования наноструктур.

Задача – формирование знаний в области моделирования наноструктур и изучения их свойств.

Требования к результатам освоения дисциплины. Процесс изучения дисциплины «Моделирование микро и нано структур» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ГОС ВПО ДНР по направлению подготовки 28.03.03 Наноматериалы и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 28.03.03 Наноматериалы.

а) общекультурных (ОК):

способностью к самоорганизации и самообразованию (ОК-7);

способностью к культурному мышлению, к обобщению, анализу, восприятию информации, постановке цели и выбору путей ее достижения (ОК-10);

б) общепрофессиональных (ОПК):

способность использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, включая знания о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук (прежде всего химии, биологии, экологии, наук о земле и человеке) (ОПК-1);

способность использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач (ОПК-3);

способность использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией (ОПК-6);

в) профессиональных (ПК):**научно-исследовательская и проектная деятельность:**

способность использовать на практике современные представления наук о свойствах веществ и материалов при переходе их в наноразмерное состояние (ноль, одно и двухмерное), о влиянии размера на свойства веществ и материалов, взаимодействии наноматериалов и наносистем с окружающей средой (ПК-2);

способность применять навыки использования (под руководством) методов моделирования, оценки, прогнозирования и оптимизации технологических процессов и свойств наноматериалов, стандартизации и сертификации материалов и процессов (ПК-4);

В результате изучения учебной дисциплины студент должен**Знать:**

Понятие моделирования; виды моделей; понятие наноструктур; особенности моделирования наноструктур

Классификация моделей; точные и приближенные решения; эмпирические модели и модели из «первых принципов»; модели, основанные на классической механике; Модели, основанные на квантовой теории

Основы квантовомеханического представления; квантование; уравнение Шредингера

Кристаллические тела; решетки Браве; базис; прямое и обратное пространства; закон дисперсии

Метод молекулярной динамики; метод самосогласованного поля; метод эмпирического псевдопотенциала; теория функционала электронной плотности; модель сильной связи; метод сверхячейки; модель складывания зоны

Виды вычислительных средств; кластерная и симметричная мультипроцессорность; параллельные вычисления; роль компьютеров; роль юникс-подобных операционных систем в моделировании

Программные пакеты, используемые для расчета и проектирования наносистем

Экспериментальные методы исследования наносистем; спектроскопия оптического поглощения; фотолюминесцентная спектроскопия; спектроскопия комбинационного рассеяния света; электронная микроскопия

Уметь:

Выбирать подходящую модель для каждого вида исследуемого материала и требуемого результата

Использовать вычислительную технику для численного решения уравнений

Выбирать требуемый вид вычислительного компьютера

Использовать юникс-подобные операционные системы для моделирования

Использовать различные программные пакеты для моделирования наноструктур
Анализировать полученные результаты, сравнивать с экспериментально полученными данными

Владеть:

Различными методами моделирования наноструктур
Навыками по работе в юникс-подобных операционных системах
Навыками в использовании специальных программных пакетов для моделирования наноструктур, в том числе с использованием кластерных суперкомпьютеров

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ И ФОРМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Порядковый номер и тема	Краткое содержание темы
<i>Содержательный модуль 1 «Введение в компьютерное моделирование наноструктур»</i>	
Тема 1. 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..
Тема 2. 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.
Тема 3. 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. Часть 6. Теория функционала электронной плотности. Часть 7. Модель сильной связи. Часть 8. Особенности моделирования наноструктур. Метод сверхячейки. Модель складывания зоны. Вычислительные средства.
Тема 4. Вычислительные средства.	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. Часть 2. Использование юникс-подобных операционных систем. Основы работы. Удаленное управление. Установка, компиляция и запуск расчетных задач. Особенности работы на кластерных суперкомпьютерах.

Содержательный модуль 2 «Программные продукты для моделирования наносистем»	
Тема 5. Программные продукты для моделирования наносистем.	Часть 1. Обзор программных пакетов, используемых для расчета и проектирования наносистем. Часть 2. Программный комплекс Avogadro. Конструирование наносистем. Оптимизация геометрий. Экспорт и импорт данных в другие системы. Часть 3. Программный пакет с открытым исходным кодом PWSCF. Теоретические основы. Основные возможности пакета.
Тема 6. Экспериментальные методы исследования наносистем	Часть 1. Обзор основных методов исследования. Часть 2. Спектроскопия оптического поглощения Часть 3. Фотолюминесцентная спектроскопия Часть 4. Спектроскопия комбинационного рассеяния света Часть 5. Электронная микроскопия

Тематический план

Содержательный модуль 1 «Введение в компьютерное моделирование наноструктур»											
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов										
	Очная форма обучения						Заочная форма обучения				
	всего	в т.ч.					всего	в т.ч.			
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа
Тема 1. Введение в компьютерное моделирование	18	2	4		12		18	2			16
Тема 2. Квантовомеханические и классические модели	16	2	4		10		18		2		16
Тема 3. Основные методы	18	2	6		10		16				16
Тема 4. Вычислительные средства.	20	4	6		10		18		2		16
Итого по содержательному модулю 1	72	10	20		42		70	2	4		64

Тематический план

Содержательный модуль 2 «Программные продукты для моделирования наносистем»											
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов										
	Очная форма обучения						Заочная форма обучения				
	всего	в т.ч.					всего	в т.ч.			
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа

		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 5. Программные продукты для моделирования наносистем.	38	6	10		22		36	1	2		33	
Тема 6. Экспериментальные методы исследования наносистем	34	4	10		20		38	1	2		35	
Итого по содержательному модулю 2	72	10	20		42		74	2	4		68	
Всего по модулю	144	20	40		84		144	4	8		132	

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЛЕКЦИОННЫХ, ПРАКТИЧЕСКИХ И ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

Темы лекционных занятий

№ п/п	Название темы	Количество часов
1	Введение в компьютерное моделирование	2
2	Квантовомеханические и классические модели	2
3	Основные методы	2
4	Вычислительные средства.	4
5	Программные продукты для моделирования наносистем.	6
6	Экспериментальные методы исследования наносистем.	4
	ВСЕГО	20

Темы практических занятий

№ п/п	Название темы	Количество часов
1	Основы квантовомеханического представления. Квантование. Уравнение Шредингера.	6
2	Кристаллические тела. Решетки Браве. Базис. Прямое и обратное пространства. Закон дисперсии. Наноструктуры.	6
3	Метод молекулярной динамики. Области применения. Особенности реализации на суперкомпьютерах.	6
4	Метод самосогласованного поля.	6
5	Метод эмпирического псевдопотенциала.	6
6	Часть 7. Модель сильной связи.	5

7	Особенности моделирования наноструктур. Метод сверхячейки. Модель складывания зоны.	5
	ВСЕГО	40

6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

Организация самостоятельной работы студентов

<i>№ п/п</i>	<i>Название темы</i>	<i>Количество часов</i>
1	Использование Unix-подобных операционных систем	8
2	Основы работы с Unix-подобными операционными системами	8
3	Командная строка. Основные команды	8
4	Файловый менеджер. Подключение по ssh. Установка и компиляция программ из исходных кодов	8
5	Программные пакеты, основанные на теории функционала электронной плотности	8
6	Пакет ABINIT. Установка. Компиляция	9
7	Подготовка исходных файлов. Запуск расчета на классическом и кластерном компьютере.	9
8	Моделирование зонной структуры материалов. Использование метода сверхячейки	9
9	Исследование наносистем.	9
10	Спектроскопия оптического поглощения. Спектроскопия фотолюминесценции. Ширина запрещенной зоны. Расчетные электронные дисперсионные зависимости. Спектроскопия КР. Резонансные условия.	8
	ВСЕГО	84

7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ (не предусмотрено рабочим планом)

8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ К ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

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.
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.

9. ОБРАЗЕЦ МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЯ

(образец варианта и критерии оценивания)

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет физико-технический

Направление подготовки: **28.03.03 Наноматериалы**

Профиль: _____

Программа подготовки: **бакалавриат**

Семестр **8**

Учебная дисциплина **Моделирование микро и nano структур**

МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА ВАРИАНТ №1

- 1.** Компьютерное моделирование. Роль компьютеров.
- 2.** Решетки Браве.
- 3.** Метод молекулярной динамики.

Утверждено на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий,
протокол № ____ от «__» _____ 20__ г.

Заведующий кафедрой
Преподаватель

Критерии оценивания модульного контроля

<i>Номер задания</i>	<i>Количество баллов</i>
Задание 1	10
Задание 2	10
Задание 3	10
Всего	30

10. ОБРАЗЕЦ ЭКЗАМЕНАЦИОННОГО БИЛЕТА

Теоретические вопросы к зачету

1. Метод самосогласованного поля.
2. Метод эмпирического псевдопотенциала.
3. Теория функционала электронной плотности.
4. Модель сильной связи.
5. Особенности моделирования наноструктур.
6. Метод сверхячейки.

7. Модель складывания зоны.
8. Виды вычислительных средств. Персональные компьютеры.
9. Виды вычислительных средств. Портативные компьютеры.
10. Виды вычислительных средств. Высокопроизводительные компьютеры.
11. Вычислительные средства, на основе графических процессоров.
12. Кластерная и симметричная мультипроцессорность.
13. Параллельные вычисления.
14. Использование юникс-подобных операционных систем. Основы работы. Удаленное управление. Установка, компиляция и запуск расчетных задач.
15. Особенности работы на кластерных суперкомпьютерах.

Зачетная работа включает три задания, за которые студент может получить max 50 баллов.

Критерии оценивания зачета

<i>Номер задания</i>	<i>Количество баллов</i>
Задание 1	15
Задание 2	15
Задание 3	20
Всего	50 баллов

11. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

По курсу «Моделирование микро и нано структур» предполагается проведение промежуточной аттестации в виде модульного контроля, выполнение индивидуальной работы и зачета. Зачет сдают студенты с целью повышения рейтинга.

Распределение баллов, которые могут получить студенты в процессе изучения дисциплины

Организационно учебная работа студента	СРС		Всего
	Индивидуальная работа	Модульный контроль	
max 10 баллов	max 10 баллов	max 30 баллов	100

Шкала соответствия баллов национальной шкале

Оценка по шкале ECTS	Оценка по 100-балльной шкале	Оценка по государственной шкале (экзамен, дифференцированный зачет)	Оценка по государственной шкале (зачет)
A	90-100	5 (отлично)	зачтено
B	80-89	4 (хорошо)	зачтено
C	75-79	4 (хорошо)	зачтено
D	70-74	3 (удовлетворительно)	зачтено
E	60-69	3 (удовлетворительно)	зачтено
FX	35-59	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи	не зачтено
F	0-34	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов	не зачтено

12. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Лекционные и практические занятия по учебной дисциплине «Моделирование микро и нано структур» проводятся в учебной лаборатории №016 «Физика полупроводников». Лаборатория оснащена комплектом учебной мебели на 18 посадочных мест, флوماстерной доской, 1 ноутбук с лицензионным программным обеспечением, доступом к сети Интернет, 1 мультимедийный проектор, 1 экран переносной, 1 Вакуумный универсальный пост -2К, 1 Форвакуумный насос, 1 Спектрометр СМ - 4А. В учебной лаборатории «Электронной микроскопии» №313, оборудованной комплектом учебной мебели на 6 посадочных мест, комплект рабочего места преподавателя, 1 ноутбук с лицензионным программным обеспечением, доступом к сети Интернет, 1 Электронный микроскоп вакуумный-100ЛМ, 1 Микроскоп металлографический-7, 1 Вакуумметр ионизационно-термопарный-2АП, 1Вакуумный универсальный пост-4.

Самостоятельная работа студентов проходит в читальном зале справочно-библиографической информационной работы (ауд. № 102: г. Донецк, пр. Гурова, 6), помещение оснащено комплектом учебной мебели на 23 посадочных места, компьютер в комплекте (1 шт); в зале электронной информации (Донецк, пр. Гурова, 6, № 104-а.). Помещение оснащено комплектом учебной мебели на 40 посадочных мест, компьютер в комплекте (6 шт);

13. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

№ п/п	Наименование	Кол-во экземпляров в библиотеке ДонНУ	Наличие электронной версии в ЭБС
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.	6	
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.	6	
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.	3	
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).		+
Дополнительная литература			
5.	Наноматериалы, нанопокрyтия, нанотехнологии: [учеб. пособие] / [Н. А. Азаренков, В. М. Береснев, А. Д. Погребняк и др.]; Харьковский нац. ун-т им. В. Н. Каразина. – Харьков : ХНУ им. В. Н. Каразина, 2009. – 209 с.	1	
6.	Терехов С. В. Физика нанообъектов: [учебное пособие] / С. В. Терехов, В. Н. Варюхин; ГОУ ВПО	1	+

	«ДонНУ» - Донецк: ДонНУ, 2013. – 418 с.		
7.	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.	1	

14. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

<http://donnu.ru/> – сайт ДонНУ.

<http://library.donnu.ru/> – сайт библиотеки

15. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДОННУ № 46484614);
2. Microsoft Office (корпоративная лицензия ДОННУ лицензия № 46472919);
3. Microsoft Visual Studio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений);
4. Лицензии GPL, Apache, BSD для свободного программного обеспечения: FreeLab, Scilab, Free Pascal, Антивирус Касперского, Adobe Acrobat Reader, xPDF

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий с изменениями (без изменений) на 20____ год.

Протокол № ____ от “__” _____ 20__ г.

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий с изменениями (без изменений) на 20____ год.

Протокол № ____ от “__” _____ 20__ г.

Заведующий кафедрой _____