



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.01.11 Моделирование и анализ материалов и компонентов нано- и микро-системной техники

Направление подготовки: **11.03.04 Электроника и нанoeлектроника**

Направленность (профиль): Электроника и робототехника

Квалификация (степень): *бакалавр*

Форма обучения: *очная*

Институт: математики, естествознания и техники

Кафедра: физики, радиотехники и электроники

	очная форма	очно-заочная форма	заочная форма
Курс	4		
Семестр/триместр	8		

Лекции	22		
Лабораторные занятия	44		
Практические (семинарские) занятия	22		
в т.ч. практическая подготовка	2		
Консультации			
Форма(ы) промежуточной аттестации	Экзамен-0,8		
Контроль	9		
Самостоятельная работа	117,2		

Всего часов: **216**

Трудоемкость: **6** зачетных единиц.

Разработчик(и) рабочей программы:

кандидат физико-математических наук, доцент

А.В. Сидоров

подпись

I. ОРГАНИЗАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКИЙ РАЗДЕЛ

Цель изучения дисциплины: Целью изучения дисциплины “Моделирование и анализ материалов и компонентов нано- и микросистемной техники” является формирование знаний умений и навыков в области математического моделирования и численных методов, используемых при моделировании свойств наносистем, процессов и компонент нанотехнологий и наноэлектроники.

Задачи изучения дисциплины:

- формирование у студентов навыков работы в пакете прикладной математики для инженерных и научных расчетов Scilab;
- получение знаний об основах численных методов решения различных математических задач;
- Изучение основных методов компьютерного моделирования нанотехнологий и наносистем, включающих построение и анализ математической модели, разработку вычислительных алгоритмов и программного обеспечения для компьютерной реализации модели, проведение вычислительного эксперимента, применительно к исследованию нанообъектов и связанных с ними процессов и явлений..

Место дисциплины в структуре ОПОП: реализуется в рамках вариативной части (части, формируемой участниками образовательных отношений) блока Б1.В.01.11.

Планируемые результаты обучения по дисциплине:

Код компетенции	Индикаторы достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине
УК-2	Знать: - способы проектирования решения конкретной задачи проекта, определения оптимальных способов ее решения, исходя из действующих правовых норм и имеющихся ресурсов и ограничений	Знает:- способы проектирования решения конкретной задачи проекта материалов и компонентов нано и микросистемной техники, определения оптимальных способов ее решения, исходя из действующих правовых норм и имеющихся ресурсов и ограничений
	Уметь: качественно решать конкретные задачи (исследования, проекта, деятельности) за установленное время	Умеет: качественно решать конкретные задачи проектирования материалов и компонентов нано и микросистемной техники
	Владеть: - навыками определения ожидаемых результатов решения поставленных задач	Владет: навыками определения ожидаемых результатов решения поставленных задач проектирования материалов и компонентов нано и микросистемной техники
	Знать:	Знает:

ПКС-2,	<ul style="list-style-type: none"> - физические и математические модели приборов, схем, микроэлектромеханических устройств различного функционального назначения; - принципы построения и функционирования микроэлектромеханических устройств; - основные физико-химические модели процессов, явлений и объектов в области микросистемной техники; - физико-химические основы процессов, протекающих на границах раздела фаз в различных нано- и микросистемах. 	<ul style="list-style-type: none"> - физические и математические модели приборов, схем, микроэлектромеханических устройств различного функционального назначения; - основные физико-химические модели процессов, явлений и объектов в области микросистемной техники; - физико-химические основы процессов, протекающих на границах раздела фаз в различных нано- и микросистемах.
	Уметь: <ul style="list-style-type: none"> - применять современные методы расчета и анализа нано- и микросистем; - применять методы и компьютерные системы моделирования и анализа материалов и компонентов нано- и микросистемной техники; - использовать методы расчета параметров и основных характеристик моделей, используемых в предметной области. 	Умеет: <ul style="list-style-type: none"> - применять современные методы расчета и анализа нано- и микросистем; - применять методы и компьютерные системы моделирования и анализа материалов и компонентов нано- и микросистемной техники;
	Владеть: <ul style="list-style-type: none"> - методами выбора способов преобразования физических величин; - методами определения физических и математических моделей отдельных систем и подсистем; - навыками адаптации и доработка поведенческих моделей чувствительных элементов; - методами разработки конструкций чувствительных элементов. 	Владеет: <ul style="list-style-type: none"> - методами определения физических и математических моделей отдельных систем и подсистем нано- и микросистемной техники;

II. СОДЕРЖАНИЕ И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу

Очная форма обучения

№ п/п	Наименование разделов и тем	Всего	Аудиторные занятия			Сам. раб.
			ЛК	ПЗ	ЛБ	
	Раздел 1. Общие вопросы математического моделирования	42	4	4	8	26
1.	Тема 1. Определение и	10,5	1	1	2	6,5

	назначение моделирования. Место моделирования среди методов научного познания.					
2.	Тема 2 Признаки классификации математических моделей. Этапы построения математических моделей.	10,5	1	1	2	6,5
3.	Тема 3. Методы построения математических моделей.	10,5	1	1	2	6,5
4.	Тема 4. Методологические основы вычислительной нанотехнологии.	10,5	1	1	2	6,5
	Раздел 2 Методы моделирования в вычислительной нанотехнологии	110,5	13	13	26	58,5
5.	Тема 5. Основные понятия и математический аппарат квантовой механики. Электронная теория строения атомов.	10,5	1	1	2	6,5
6	Тема 6. Метод Хартри-Фока.	14,5	2	2	4	6,5
7.	Тема 7. Физико-химические закономерности строения молекул и теория химической связи.	10,5	1	1	2	6,5
8	Тема 8. Метод валентных схем.	10,5	1	1	2	6,5
9	Тема 9. Расчет поверхности потенциальной энергии.	10,5	1	1	2	6,5
10	Тема 10. Межмолекулярные силы и потенциалы взаимодействия частиц.	10,5	1	1	2	6,5
11	Тема 11. Метод молекулярной механики.	14,5	2	2	4	6,5
12	Тема 12. Моделирование методом молекулярной динамики.	14,5	2	2	4	6,5
13.	Тема 13. Методы моделирования Монте-Карло.	14,5	2	2	4	6,5
	Раздел 3 Моделирование материалов и процессов нанотехнологии	63	5	5	10	32,7

14	Тема 14. Механизм образования супрамолекулярных систем.	10,5	1	1	2	6,5
15	Тема 15. Модели нанокластеров.	10,5	1	1	2	6,5
16	Тема 16 Молекулярная самосборка.	10,5	1	1	2	6,5
17	Тема 17. Концепция многомасштабного моделирования.	10,7	1	1	2	6,7
18	Тема 18. Многомасштабное моделирование энергетических процессов	10,5	1	1	2	6,5
	Форма отчетности/	экзамен -0,8				
	Консультации					
	Контроль	9				
	Итого за 8 семестр	214	22	22	44	117,2
	в т.ч. практическая подготовка	2				
	ИТОГО:	216	22	22	44	117,2

Очно-заочная форма обучения (не реализуется)

Заочная форма обучения (не реализуется)

III. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Текущая аттестация проводится в форме контрольной работы, тестирования.

Типовой вариант контрольной работы

1 вариант

1. Напишите программу решения одномерного уравнения Шредингера, используйте для этого алгоритм Эйлера-Кромера. Найдите энергию основного состояния и первый возбужденный уровень частицы в бесконечной прямоугольной потенциальной яме, сравните полученный результат с аналитическим решением.

2. Составьте программу вариационного метода Монте-Карло для расчета энергии основного состояния квантового гармонического осциллятора $V(x)=0.5x^2$.

2 вариант

1. Создайте входной файл в пакете GAMESS US для решения следующей задачи

а) Расчет оптимальной геометрии молекулы водорода в базисном наборе ОСТ, положите число гауссианов в наборе равным трем. Какие изменения необходимо внести во входной файл, чтобы уточнить энергию системы в рамках базисного набора Попла.

б) Расчет оптимальной геометрии молекулы метана CH_4 в базисном наборе ОСТ, положите число гауссианов в наборе равным пяти. Какие изменения необходимо внести во входной файл, чтобы уточнить энергию системы в рамках базисного набора Попла.

в) Расчет потенциальной поверхности молекулы водорода в направлении от первого атома ко второму.

г) Расчет оптимальной геометрии молекулы воды и градиента энергии по осям системы координат в тех точках, где находятся атомы системы

2. Напишите программу для расчета движение волнового пакета, падающего на потенциальный барьер, расположенный при . Положите $x_{\min} = -30$, $x_{\max} = 30$, $x_0 = -20$, $\Delta x = 4$, $dx = 0.1$, $k_0 = 15$, $n_k = 20$, $dt = 0.1$, $t_{\max} = 7$, высоту барьера $V_0 = 150$, его длину $a = 0.5$ высоту барьера , его длину . Качественно опишите движение волнового пакета. Чему равна энергия частицы? Сохраняется ли форма волнового пакета при движении, как физически интерпретировать результат в этом случае?

Тестовые задания

Часть А

А1. При моделировании используются модели каких типов

1. Описывающие 2. Объясняющие 3. Предсказывающие 4. 1 и 2и 3. 5. 1 и 3

А2. аналогом процесса измерения в вычислительном эксперименте является

1. Модель 2. Программа для компьютера 3. Тестирование программы 4. Расчет 5. Анализ данных.

А.3 В каком методе моделирования решаются уравнения движения Ньютона для системы многих частиц с последующим расчетом термодинамических характеристик системы?

1. Метод молекулярной механики 2. Метод молекулярной динамики 3. Метод Монте-Карло 3. Метод Хартри 4. Метод молекулярных орбиталей.

А4. Интеграл для обменной энергии в методе Хартри-Фока обусловлен

1. Принципом Паули 2. Большой разницей в значении скорости электронов и ядер 3. Взаимодействием электронов и ядер 4. Электростатическим отталкиванием электронов

А5. Атомные орбитали, представляющие линейную комбинацию орбиталей, соответствующим нескольким различным значениям азимутального квантового числа называют

1. sp орбиталями 2. гибридными 3. комбинируемыми 4. линейными 5. суперпозиционными

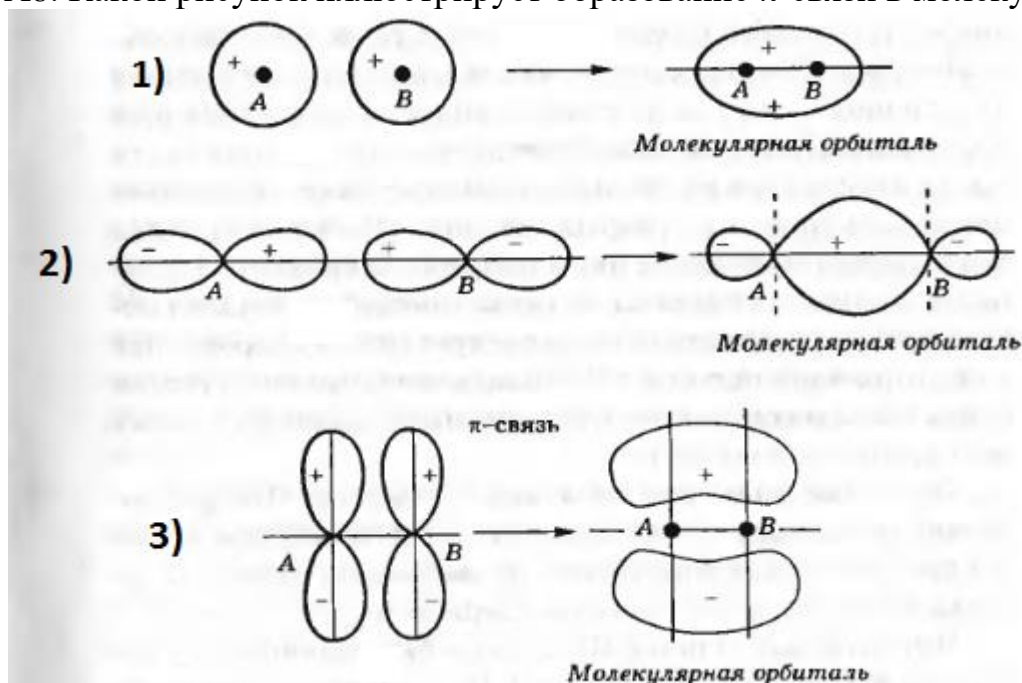
А6. Утверждение о том, что существует взаимнооднозначное соответствие между плотностью основного состояния электронной подсистемы, находящейся во внешнем потенциале атомных ядер и самим потенциалом ядер носит название

1. теоремы Козна 2. аксиомы Томаса-Ферми 3. теоремы Хоэнберга-Кона 4. Леммы Кона-Шэма

А7. Теорема Гельмана-Фейнмана которой базируется описание взаимодействий в молекулах гласит

1. Сила, действующая на ядро в молекуле может рассматриваться как сумма классических электростатических сил отталкивания со стороны других ядер и притяжения со стороны непрерывно распределенного в пространстве электронного облака молекулы
2. Существует взаимно однозначное соответствие между плотностью основного состояния электронной подсистемы, находящемся во внешнем потенциале атомных ядер, и самим потенциалом ядер
3. Энергия электронной подсистемы, записанная как функционал электронной плотности, имеет минимум, равный энергии основного состояния

А8. Какой рисунок иллюстрирует образование π -связи в молекуле?



1) 1 2) 2 3) 3 4) 1 и 2 5) 2 и 3

А9) К Ван-дер-Ваальсовым силам взаимодействия между молекулами относят

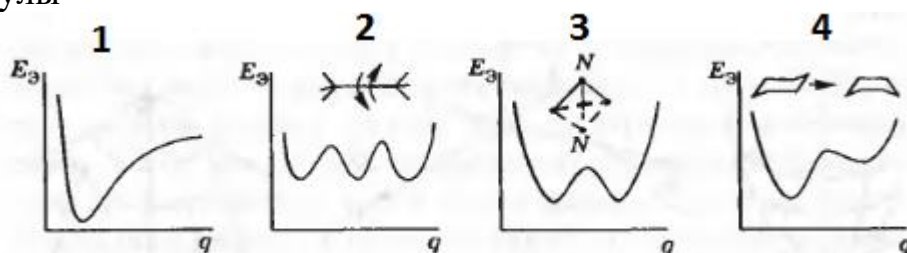
1. Ориентационное 2. Дисперсионное 3. Индукционное 4. 1 и 2 5. 1 и 2 и 3

A10. В модельном потенциале Леннарда-Джонса

1. Силы отталкивания обратно пропорциональны 6-й степени расстояния, силы притяжения обратно пропорциональны 12-й степени расстояния
 2. Силы отталкивания обратно пропорциональны 12-й степени расстояния, силы притяжения обратно пропорциональны 6-й степени расстояния
 3. Силы отталкивания обратно пропорциональны 6-й степени расстояния, силы притяжения обратно пропорциональны 6-й степени расстояния
 4. Силы отталкивания пропорциональны 6-й степени расстояния, силы притяжения пропорциональны 12-й степени расстояния
 5. Силы отталкивания пропорциональны 12-й степени расстояния, силы притяжения пропорциональны 6-й степени расстояния

Часть Б

Б1) Поставьте в соответствие схему сечения потенциальной поверхности типу молекулы



А) Конформационная перестройка Б) Молекула с внутренним вращением В) Инверсия в молекуле Г) Молекула с внутренним вращением

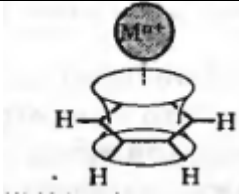
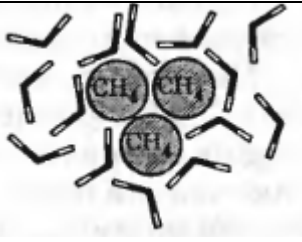
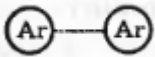
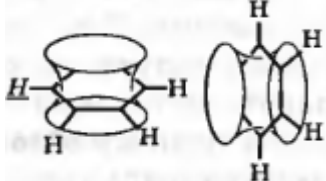
Б2) Расположите в порядке возрастания этапы расчета констант скоростей химических реакций методом классических траекторий

А)	Интегрирование классических уравнений движения	1
Б)	Усреднение по начальным условиям и квантовым состояниям молекул	2
В)	Траектории ядер	3
Г)	Задание поверхности потенциальной энергии U	4

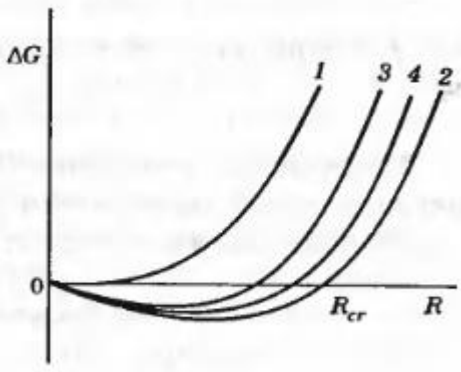
Б3) Поставьте в соответствие межчастичному потенциалу структуры, которую можно промоделировать этим потенциалом

1. потенциал Терсоффа	А) Молекула кислорода
2. Потенциал Леннарда-Джонса	Б) кристалл аргона
3. потенциал Морзе	В) критсллический кремний

Б4) Поставьте в соответствие типу взаимодействия иллюстрацию

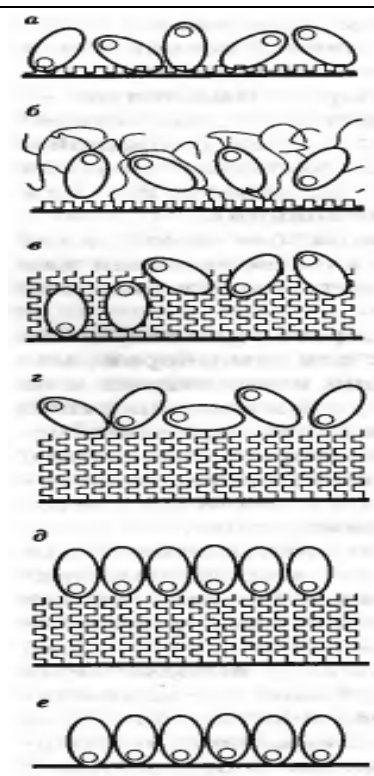
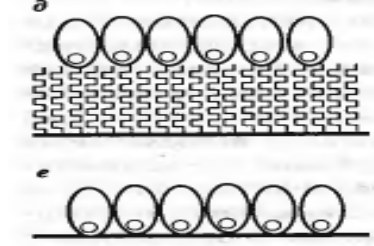
1) Эффект растворителя	 A)
2) Катион-π	 Б)
3) π-стекинг	 В)
4) дисперсионное	 Г)

Б5) Поставьте в соответствие графику изменения свободной энергии Гиббса в зависимости от размера кластера- тип кластера

	А) кластеры после действия поверхностно активных веществ
	Б) ансамбль отдельных атомов в твердом теле
	В) система взаимодействующих кластеров
	Г) изолированный кластер

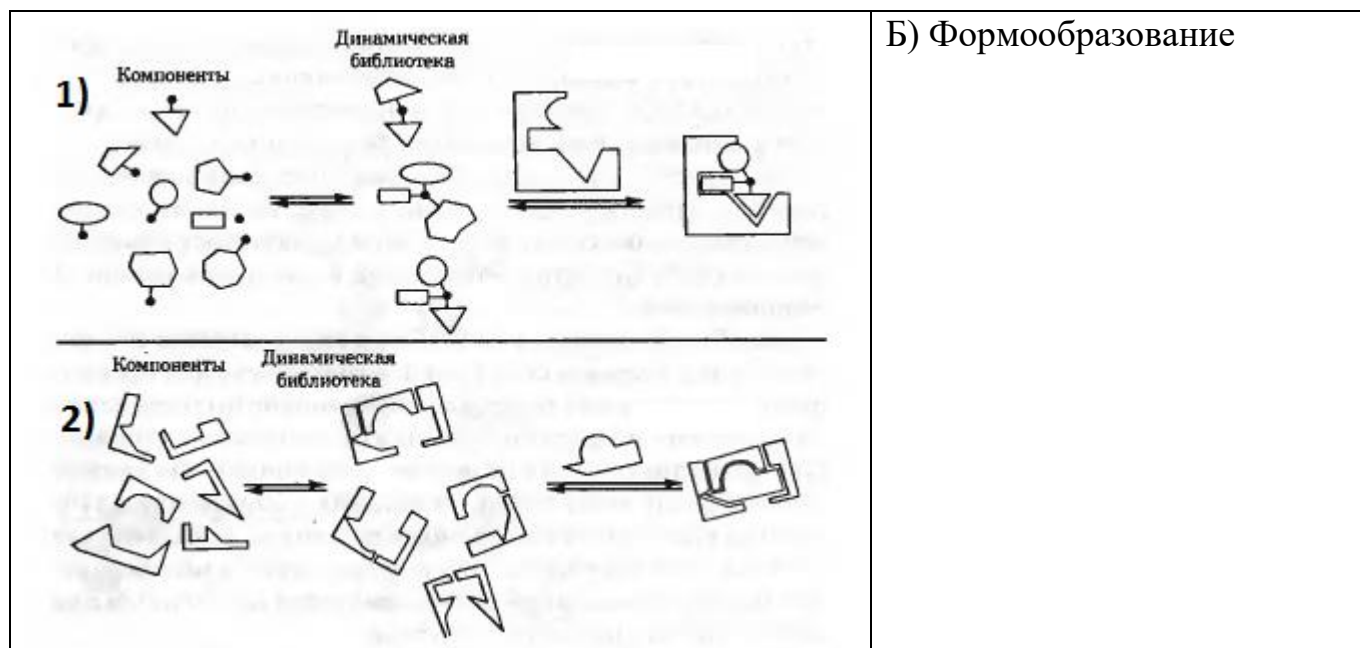
Б6) Поставьте в соответствие различные способы получения самособирающихся монослоев протеинов

	1 Прямое сайт - специфическое присоединение к поверхности
	2 Присоединение к ССМ с неориентированным расположением
	3 Вкрапление протеинов к полиэлектролитам

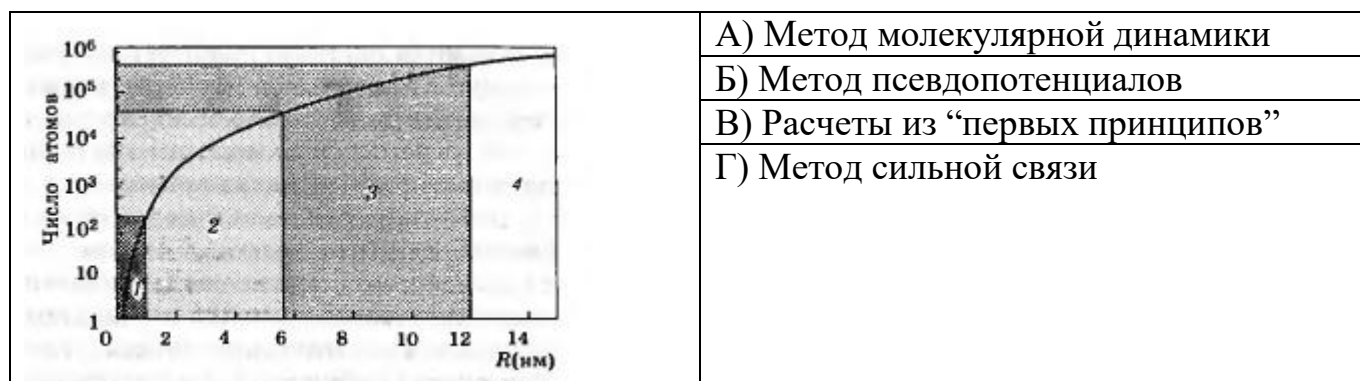
	4 Вкрапление в ССМ
	5 присоединение к ССМ с неориентированным расположением
	6 Физическая адсорбция

Б7) Поставьте соответствие подходам в процессе распознавания молекул

	А) Формование
--	---------------



Б8) Поставьте в соответствие типу нанокластера – метод используемый для его моделирования



Б9) Поставьте соответствие между названием компьютерного пакета для моделирования наносистем и типом задач для которых он предназначен

1. ABINIT	А) Программа на основе метода молекулярной динамики для моделирования и расчета биополимеров, биомолекул, твердых веществ, а также крупнозернистых систем
2. AMPAS	Б) Комплекс полуэмпирических программ для расчета электронного спектра молекул

3. LAMPPS	В) Пакет для расчета электронного спектра, пространственной структуры и макроскопических свойств различных систем, с использованием теории функционала электронной плотности, псевдопотенциала и базиса плоских волн
-----------	--

Б10) Поставьте соответствие между натурным и вычислительным экспериментом

1 Образец	А) Расчет
2 Физический прибор	Б) Модель
3 Калибровка	В) Программа для компьютера
4 Измерение	Г) Тестирование программы
5 Анализ данных	Д) Анализ данных

Часть С

С1. Создайте входной файл в пакете GAMESS US для решения следующей задачи

а) Расчет оптимальной геометрии молекулы водорода в базисном наборе ОСТ, положите число гауссианов в наборе равным трем. Какие изменения необходимо внести во входной файл, чтобы уточнить энергию системы в рамках базисного набора Попла.

б) Расчет оптимальной геометрии молекулы метана CH_4 в базисном наборе ОСТ, положите число гауссианов в наборе равным пяти. Какие изменения необходимо внести во входной файл, чтобы уточнить энергию системы в рамках базисного набора Попла.

в) Расчет потенциальной поверхности молекулы водорода в направлении от первого атома ко второму.

г) Расчет оптимальной геометрии молекулы воды и градиента энергии по осям системы координат в тех точках, где находятся атомы системы

2. Напишите программу для расчета движение волнового пакета, падающего на потенциальный барьер, расположенный при . Положите $x_{\min} = -30$, $x_{\max} = 30$, $x_0 = -20$, $\Delta x = 4$, $dx = 0.1$, $k_0 = 15$, $n_k = 20$, $dt = 0.1$, $t_{\max} = 7$, высоту барьера $V_0 = 150$, его длину $a = 0.5$ высоту барьера , его длину . Качественно опишите движение волнового пакета. Чему равна энергия частицы? Сохраняется ли форма волнового пакета при движении, как физически интерпретировать результат в этом случае?

С2. Напишите программу решения одномерного уравнения Шредингера, используйте для этого алгоритм Эйлера-Кромера. Найдите энергию основного состояния и первый возбужденный уровень частицы в бесконечной прямоугольной потенциальной яме, сравните полученный результат с аналитическим решением.

С3. С какой целью проводят тестовые расчеты при выполнении вычислительного эксперимента?

С4. В чем состоит принципиальное ограничение возможностей расчета «из первых принципов»?

Промежуточная аттестация обучающихся осуществляется в форме экзамена, с использованием следующих оценочных материалов *перечень вопросов экзамену*.

Вопросы к экзамену

1. Определение, цели и назначение математического моделирования.
2. Классификация математических моделей.
3. Этапы построения математических моделей.
4. Принципы построения математических моделей.
5. Методологические основы моделирования в нанотехнологии.
6. Основные понятия и математический аппарат квантовой механики.
7. Свойства одноэлектронных атомов.
8. Метод Хартри-Фока.
9. Атомные орбитали.
10. Основы теории функционала плотности.
11. Физико-химические закономерности строения молекул.
12. Теория химической связи.
13. Приближение Борна-Оппенгеймера.
14. Метод молекулярных орбиталей.
15. Расчет поверхности потенциальной энергии.
16. Потенциалы взаимодействия частиц.
17. Метод молекулярной механики.
18. Моделирование методом молекулярной динамики.
19. Методы моделирования Монте-Карло.
20. Механизм образования супрамолекулярных систем.
21. Модели нанокластеров.
22. Молекулярная самосборка.
23. Концепция многомасштабного моделирования.
24. Многомасштабное моделирование энергетических процессов.
25. Моделирование в наноструктурной области.
26. Моделирование макроскопических систем.
27. Обзор прикладных компьютерных пакетов для расчета наносистем

IV. ПЕРЕЧЕНЬ ЛИТЕРАТУРЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

5.1. Основная литература

1. Звонарев, С.В. Моделирование структуры и свойств наносистем : учебно-методическое пособие / С.В. Звонарев, В.С. Кортон, Т.В. Штанг ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина. - Екатеринбург : Издательство Уральского университета, 2014. - 121 с. : табл., ил. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-7996-1203-0 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=276022> (Дата обращения 01.09.2020.)

5.2. Дополнительная литература

1. Заводинский, В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем / В.Г. Заводинский. - Москва : Физматлит, 2013. - 175 с. : ил., схем., табл. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-9221-1397-7 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=457710> (Дата обращения 01.09.2020.)
2. Введение в математическое моделирование : учебное пособие / ред. П.В. Трусов. - Москва : Логос, 2004. - 439 с. - ISBN 5-94010-272-7 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=84691> (Дата обращения 01.09.2020.)

V. ПЕРЕЧЕНЬ РЕСУРСОВ ИНФОРМАЦИОННО-ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ «ИНТЕРНЕТ», НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№ пп	Ссылка на информационный ресурс	Наименование разработки в электронной форме	Доступность
1.	http://www.nanometer.ru/	«Нанометр» — нанотехнологическое сообщество	Свободный доступ
2.	http://www.rusnanonet.ru/	Российский нано-портал RusNanoNet: современные нанотехнологии и новые наноматериалы. Сайт о популярных событиях в мире нанотехнологий.	Свободный доступ
3.	http://window.edu.ru	Единое окно доступа к образовательным ресурсам»-информационная система для обеспечения свободного доступа к интегральному каталогу образовательных интернет-ресурсов и к электронной библиотеке учебно-методических материалов для общего и профессионального образования.	Свободный доступ

VI. СОВРЕМЕННЫЕ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЕ БАЗЫ ДАННЫХ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ СПРАВОЧНЫЕ СИСТЕМЫ

1.	http://www.biblioclub.ru	Электронно-библиотечная система (ЭБС) Университетская библиотека онлайн	Регистрация через любой университетский компьютер. В дальнейшем предоставляется неограниченный индивидуальный доступ из любой точки,
----	---	--	---

			в которой имеется доступ к сети Интернет
2.	www.elibrary.ru	Российский информационный портал в области науки, технологии, медицины и образования	Свободный доступ
3.	http://perst.issp.ras.ru/	ГНЦ РФ «Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт"»: Базы данных	Свободный доступ

VII. ЛИЦЕНЗИОННОЕ И СВОБОДНО РАСПРОСТРАНЯЕМОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

При реализации учебной дисциплины применяется следующее лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Windows;
- Microsoft Office;
- LibreOffice;
- GAMESS – свободно, распространяемое ПО;
- Scilab – свободно, распространяемое ПО.

VIII. ОБОРУДОВАНИЕ И ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА ОБУЧЕНИЯ, НЕОБХОДИМЫЕ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Учебные занятия проводятся в аудиториях, укомплектованных специализированной мебелью, в том числе стационарными или переносными техническими средствами обучения (проектор, экран, компьютер/ноутбук).

Лабораторные занятия проводятся в специализированных лабораториях, оснащенных персональными компьютерами с установленными на них программами -

Microsoft Windows 7 Профессиональная

(8 лицензий WinPro 7 RUS Upgrd OLP NL Acdmc

Торговый посредник: Softline Дата заказа: 2010-10-27

Лицензия: 47592632 Родительская программа: OPEN 67577298ZZE1210)

Microsoft Windows XP with SP3

(3 лицензии WinPro 7 RUS Upgrd OLP NL Acdmc

Торговый посредник: Softline Дата заказа: 2010-10-27

Лицензия: 47592632 Родительская программа: OPEN 67577298ZZE1210)

Microsoft Office 2007 Professional

(11 лицензий OfficeProPlus 2007 RUS OLP NL Acdmc

Торговый посредник: ООО Рэдком Дата заказа: 2008-09-19

Лицензия: 44544996 Родительская программа: OPEN 63786020ZZE1004)

Самостоятельная работа проводится в кабинетах, оснащенных компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета.