

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**Физико-технический институт
Кафедра физической электроники и нанопластики**

Утверждено:
на заседании кафедры физической
электроники и нанопластики
протокол №3 от « 12 » января 2022г.

Согласовано:
Председатель УМК ФТИ

Зав. кафедрой  Шарипов Т.И.

 / Балапанов М.Х.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

дисциплина МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ В НАНОМАТЕРИАЛАХ
(наименование дисциплины)

вариативная часть, дисциплина по выбору
(Цикл дисциплины и его часть (базовая, вариативная, дисциплина по
выбору))

Направление подготовки

030303 радиофизика, квалификация (степень) бакалавр
(наименование ООП ВПО направления подготовки или специальности с
указанием кода)

Профиль(и) подготовки

Радиофизика

Разработчики (составители)
д.х.н., проф. Доломатов М.Ю.
(уч. степень, уч. звание)


подпись

Уфа 2022

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы (*с ориентацией на карты компетенций*)
2. Указание места дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы;
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся;
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных занятий;
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю);
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю);
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть «Интернет»), необходимых для освоения дисциплины (модуля);
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля);
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости);
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю).

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы (с ориентацией на карты компетенций)

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по данному направлению подготовки:

ОПК-1 способностью к овладению базовыми знаниями в области математики и естественных наук, их использованию в профессиональной деятельности

ПК-3 владением компьютером на уровне опытного пользователя, применению информационных технологий

Табл. 1

Результаты обучения		Формируемая компетенция (с указанием кода)	Примечание
Знания	1. Знать основные материалы, используемые в электронной технике, технологии их получения и области применения	ОПК-1	
	Материалы для нано и молекулярной электроники;	ОПК-1	
	Базовые принципы моделирования нано и молекулярных гетероструктур для наноэлектроники;	ОПК-1	
Умения	1. Использовать знания, полученные при изучении курса моделирования в наноматериалах в изучении нано и микроэлектроники	ОПК-1	
	2. Рассчитывать на ЭВМ структуру, энергию ионизации, работу выхода проводимость, концентрацию электронов и дырок в наноматериалах	ОПК-1, ПК-3	
	3. Использовать компьютерные математические методы для описания характеристик наноматериалов	ОПК-1, ПК-3	
Владения (навыки / опыт деятельности)	1. Владеть компьютерными методами для расчета совокупности основных свойств наноматериалов.	ОПК-1, ПК-3	
	2. Владеть компьютерными методиками решения задач по расчету основных характеристик наноматериалов используя справочные данные и научно-техническую литературу	ОПК-1, ПК-3	

2. Указание места дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Методы моделирования в наноматериалах» является дисциплиной по выбору и входит в раздел «Б1.В.ДВ.4.2» (вариативная часть) ФГОС по направлению подготовки 011800 «Радиофизика».

Знания, полученные в результате освоения курса «Методы

моделирования в наноматериалах» позволяют сформировать знания, навыки и умения, позволяющие самостоятельно проводить моделирование наноэлектронных систем, принципы формирования электронных гетероструктур.

Предусмотренные программой знания являются базой для последующего решения специалистами научных и инженерных задач и формирования квалифицированных специалистов.

Дисциплина «Методы моделирования в наноматериалах» является необходимой в плане теоретической подготовки будущих высококвалифицированных специалистов радиофизиков и электроников, так как современная молекулярная электроника, как и нанотехнология в целом, – междисциплинарная наука, в которой широко используются методы информационных технологий и математического моделирования. Поэтому переход микроэлектронных технологий на наноуровень и становление молекулярной электроники, как области науки и техники, выдвигает качественно новые требования к специалистам в этой области, которым необходимо обладать знаниями в области разработки наночастиц и молекулярных устройств с заданными свойствами. Решение этой задачи невозможно без моделирования на всех уровнях структурной организации материи.

Изучение данной дисциплины базируется на межпредметных связях. Курс «Методы моделирования в наноматериалах» является продолжением и развитием предшествующего курсов «Информатика», «Квантовая теория», «Электродинамика», «Общая химия», «Физические основы наноэлектроники» Основные положения дисциплины должны быть использованы студентами в дальнейшем при выполнении дипломных работ. Приступая к изучению курса «Методы моделирования в наноматериалах», студенты должны владеть основными понятиями и методами математического анализа, линейной алгебры, комбинаторики, информатики и основ электроники. Приступая к выполнению лабораторных и практических занятий по данному курсу, студенты должны свободно владеть практическими навыками работы на современных персональных компьютерах должны иметь навыки работы с операционными системами ЭВМ - Linux, Windows, Ms. Office, а также должны знать хотя бы одну информационную систему расчета молекул, например GYPERCHEM, GAUSSIAN и др.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Согласно ОП подготовки бакалавра по направления 011800 «Радиофизика», профиль «Радиофизика и электроника» и рабочему учебному плану (РУП) по дисциплине «Методы моделирования в наноматериалах» отводится:

общий объем часов по дисциплине 72 (всего 2 ЗЕТ);
 в том числе аудиторных часов 36;
 контактных часов 36.

Разбиение общего числа часов по видам учебных занятий с указанием их объемов приведено в таблице 2

Табл. 2

Виды учебной работы	Общий объем курса в 8-м семестре
Аудиторные занятия	36
Лекции	12
Лабораторные занятия	22
Самостоятельная работа студентов	36
Контроль самостоятельной работы (КСР)	2
Виды контроля	Зачет

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных занятий

В таблице 3 приведены основные разделы дисциплины « Методы моделирования в наноматериалах» и раскладка по основным видам занятий количества часов по каждому разделу.

Табл.3

№	Основные темы (разделы) дисциплины	Количество часов			
		Лекции	Лабораторные занятия	Самост. работа	КСР
1	Физические принципы моделирования наноматериалов	4	0	6	1
2	Моделирование наноматериалов на различных уровнях организации материи	8	22	30	1
	Итого:	12	22	36	2

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины _____ Методы моделирования в наноматериалах _____ на _____ 8 _____ семестр
(наименование дисциплины)

Рабочую программу осуществляют:

Зачетных единиц трудоемкости (ЗЕТ) 2

Учебных часов:

лекций 12

Лекции: профессор кафедры физической электроники
нанопластики, д.х.н., Доломатов М.Ю.
(должность, уч. степень, ф.и.о.)

лабораторных 22

самостоятельная работа студентов 36
КСР 2

В том числе контактных часов 36

Лабораторные и практические занятия: профессор кафедры
физической электроники нанопластики, д.х.н., Доломатов М.Ю.
(должность, уч. степень, ф.и.о.)

8 семестр

Таблица 4

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов (лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа)	Кол-во часов аудиторной работы	Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам	Задания по самостоятельной работе студентов с указанием литературы, номеров задач	Количество часов самостоятельной работы	Форма контроля самостоятельной работы студентов (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
1	2	3	4	5	6	7	8
Модуль 1: физические принципы моделирования наноматериалов							
1.	Основные термины и определения нанотехнологий Классификация наноматериалов и их функции Мезофизика. Особенности физики наносостояния. Уникальные поверхностные свойства наночастиц Размерные эффекты Самоорганизация наноматериалов Виды наночастиц и наноматериалов Классификация методов моделирования	Лекция Лаб. работы №	4 0		По списку заданий	6	Текущие проверки конспектов, изучения литературы, защита
Модуль 2: моделирование материалов на различных уровнях организации материи							
2	Особенности моделирования наноматериалов на макроскопическом, молекулярном и квантовом уровне	Лекция Лаб. работа №	1		По списку заданий	6	Текущие проверки конспектов, изучения литературы, защита отчетов по лабораторным работам

3	<p>Моделирование наноматериалов на квантовом уровне С использованием квантовой теории молекул. Моделирование наноматериалов на квантовом уровне С использованием квантовой теории молекул. Модели построенные на теории молекулярных орбиталей. Методы Хартри Фока, функционала плотности Коэна- Шема Методы моделирования твердых тел Использования классических МО и кристаллических МО (функций Блоха) в молекулярной наноэлектронике.</p>	Лекция Лаб.работа №	2	[1]:§ 4.7, 4.8 [2]:	По списку заданий	7	Текущие проверки конспектов, изучения литературы, защита отчетов по лабораторным работам
4	<p>Моделирование наноматериалов на молекулярном уровне. Метод молекулярной динамики Задачи оптимизации геометрии Матрица Гессе и ее свойства Градиентные методы оптимизации Алгоритм Девидона- Флечера- Пауэлла Алгоритм Верле Термостаты в методе молекулярной динамики Построение топологических карт энергии молекул и наночастиц Корреляционные конформационные функции и учет эргодичности</p>	Лекция Лаб.работа №	2 5	[1]:§ 5.2-5.4, [2]:	По списку заданий	6	Текущие проверки конспектов, изучения литературы, защита отчетов по лабораторным работам

	<p>Моделирование геометрии и механических свойств наночастиц на основе фуллеренов, квантовых точек ,нанотрубок</p>						
5	<p>Моделирование на макроуровне</p> <p>Моделирование на макроуровне</p> <p>Фазовые равновесия и термодинамические модели систем наночастиц.</p> <p>Влияние размера частиц на фазовое равновесие.</p> <p>Потенциал Гиббса- Гельмгольца образования кластеров и наночастиц.</p> <p>Термодинамика нанокластеров.</p> <p>Модели Хойла</p> <p>Зависимость температуры плавления от размера наночастиц.</p> <p>Значение поверхностного натяжения на границах поверхности наноматериалов.</p> <p>Транспортные явления, процессы переноса импульса, тепла , зарядов и массы в низкоразмерных системах.</p> <p>Термодинамические методы моделирования с использованием неравновесной термодинамики</p>	<p>Лекция</p> <p>Лаб.работа №</p>	2		По списку заданий		<p>Текущие проверки конспектов, изучения литературы, защита отчетов по лабораторным работам</p>

6	Моделирование процессов переноса с участием наночастиц	Лекция Лаб.работа №	1		По списку заданий		Текущие проверки конспектов, изучения литературы, защита отчетов по лабораторным работам
		ИТОГО	16 32 54			55	2 зачет

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

При изучении дисциплины «Методы моделирования в наноматериалах» предусмотрены следующие виды самостоятельной работы:

Самостоятельная работа с литературой. Темы для самостоятельного изучения приведены в рабочей программе по каждому модулю с указанием параграфов основной и дополнительной литературы, в достаточном количестве содержащейся в библиотеке. Контроль данной работы проходит в начале каждого лекционного занятия в течение 10-15 минут по тестовым заданиям.

Самостоятельная подготовка по материалам лекций к прохождению промежуточного и рубежного контроля. Вопросы по данным видам контроля приведены в соответствующей главе и выдаются студентам заблаговременно. Контроль данной работы проходит в начале каждого лекционного занятия в течении 10-15 минут по тестовым заданиям.

Самостоятельная работа по подготовке к лабораторной работе, включающая в себя изучение теоретического материала, планирование компьютерных эксперимента. Необходимый методический материал приведен в Методических указаниях к лабораторной работе, выдаваемых студенту преподавателем заранее. Перечень методических указаний приведен в пункте дополнительной литературы. Контроль данной работы проходит в начале каждого лабораторного занятия в течении 10-15 минут в виде допуска по результатам рабочей дискуссии микро группы студентов, совместно выполняющих данный физический эксперимент.

Самостоятельная работа по математической обработке и анализу полученных результатов, подготовке отчета и ответа на контрольные вопросы. Контроль данной работы проходит на лабораторном занятии в виде защиты отчета и ответа на контрольные вопросы.

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

6.1. Контрольно-оценочные материалы, формы и критерии контроля знаний

Текущая, промежуточная и итоговая аттестация проводится по модульно-рейтинговой системе согласно Положению о модульно-рейтинговой системе обучения и оценки успеваемости студентов

Текущий контроль - это контроль над всеми видами аудиторной и внеаудиторной работы студентов по данному дисциплинарному модулю, результаты которой оцениваются до рубежного контроля.

При оценке качества знаний студентов, обучающихся по данной дисциплине, используется модульно-рейтинговая система, которая включает в себя текущий, рубежный и итоговой контроль знаний

студентов, при этом распределение баллов рейтинговой оценки между видами контроля устанавливается в следующем соотношении:

Форма итоговой аттестации	Количество баллов			
	Текущий контроль	Рубежный контроль	Итоговый контроль	Сумма баллов
Зачет	50	30	20	100

Текущий контроль по теоретическому материалу (лекционному и материалу самостоятельного изучения) проводится в ходе проведения практических занятий. Все студенты получают индивидуальные задания, по которым готовят выступления в виде компьютерных презентаций. При выполнении письменной работы все студенты получают индивидуальные вопросы, на которые требуется дать краткий исчерпывающий ответ. Раздел (тема) тестирования или письменной работы объявляется студентам заранее. Текущий контроль по практическим занятиям также проводится в виде проверки умения самостоятельно решать типовые задачи, достоверности полученных результатов при их решении и умения анализировать полученные результаты.

Выступления на семинарских занятиях, письменные тестовые или письменные контрольные работы оцениваются в баллах (заранее установленной величины) по сопоставления с заранее готовыми однозначными ответами, не допускающими двойного толкования или оспаривания, рассмотренные в лекциях и (или) изложенные в рекомендованной литературе.

Рубежный контроль является итоговым по завершению выполнения очередного модуля. Осуществляется в форме коллоквиума по программе курса. При рубежном контроле подводится также итог посещаемости прошедшего периода обучения. Письменные работы, оцениваются в баллах (заранее установленной величины) по сопоставления с готовыми однозначными ответами, не допускающими двойного толкования или оспаривания, рассмотренные в лекциях и (или) изложенные в рекомендованной литературе.

Итоговый контроль проводится в форме суммирования набранных в период учебы баллов по пройденному лекционному материалу и практическим занятиям и зачету. Критерий оценки итогового контроля следующее:

- если студент по итогам текущего и рубежного контроля с учетом поощрительных набрал 60 и более баллов, то студенту выставляется оценка «зачтено» без его участия в зачете;

- если студент по итогам текущего и рубежного контроля набрал от 45 до 59 баллов, то студент допускается к сдаче зачета;

В случае несогласия студента с итоговой оценкой он может сдавать зачет на общих основаниях по билетам. Билет содержит два вопроса, и каждый вопрос оценивается от 0 до 10 баллов. Набранные при этом баллы

суммируются с баллами набранными студентом в семестре.

Если студент не допущен к итоговому контролю, то он изучает неосвоенные им темы и выполняет практические работы в сроки, установленные деканатом для ликвидации задолженностей. Набранные при этом баллы также суммируются с баллами набранными студентом в семестре.

6.2. Критерии оценки итогового контроля.

Студент получает зачет согласно бально-рейтинговой системе. Итоговый контроль оценивается максимально в 20 баллов, если студент отвечает правильно на 10 из 10 предложенных вопросов.

При приеме экзамена используются следующие критерии.

(30 баллов)

Ответ на вопрос должен показать глубокие, прочные знания студента. Ответ должен быть логичным и доказательным. Студенту необходимо знать основные понятия, термины, развернутые определения, использовать современные данные науки. Студент должен устанавливать причинно-следственные связи, применять знания в новой ситуации. Студент должен продемонстрировать умение делать аргументированные выводы.

(20 баллов)

Ответ студента должен показать глубокие, прочные знания. Ответ должен быть логичным и доказательным. Студенту необходимо знать основные понятия, термины, развернутые определения, использовать данные современной науки. Студенту необходимо устанавливать причинно-следственные связи, излагать материал с учетом принципов объективности и научности. В ответе допускаются отдельные несущественные неточности.

(10 баллов)

Ответ на вопросы должен показать знания поставленных вопросов. Необходимо знать основные понятия, термины, развернутые определения, фактический материал, использовать данные современной науки. В ответе могут допускаться существенные ошибки и неточности.

(0 баллов)

Ответ на поставленные вопросы показывает незнание его содержания, основных понятий, терминов. Студент не умеет устанавливать причинно-следственные связи, излагать материал с учетом принципов научности и объективности, анализировать указанные источники. Ответ студента не соответствует вопросу, а так же при отсутствии ответа и при отказе от ответа.

При изучении дисциплины «Физика (оптика)» текущий контроль осуществляется в виде письменных работ (16 баллов за семестр); допуска, выполнение лабораторных работ, оформление отчета (24 балла). Всего за семестр 40 баллов. Рубежный контроль проводится в форме коллоквиума (5 баллов); тестирования (5 баллов); проведения контрольных работ (8 баллов); защиты отчетов по лабораторным работам (12 баллов). Всего за семестр 30 баллов. По учебному плану итоговый контроль проводится в форме экзамена

(30 баллов).

Преподаватель может поощрить студентов за участие в научных конференциях, конкурсах, олимпиадах, за активную работу на аудиторных занятиях, за публикации статей, за работу со школьниками, выполнение заданий повышенной сложности в виде поощрительных баллов (до 10 баллов за семестр).

Перевод оценки из 100-балльной в четырехбалльную производится следующим образом:

- отлично - от 80 до 110 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- хорошо - от 60 до 79 баллов;
- удовлетворительно - от 45 до 59 баллов;
- неудовлетворительно - менее 45 баллов.

6.3. Вопросы к текущему и рубежному контролю по теоретическому материалу

Раздел 1 Физические принципы моделирования наноматериалов

1. Основные термины и определения молекулярной и наноэлектроники
2. Перспективы и проблемы развития нанотехнологий
3. История развития методов моделирования молекул и наночастиц
4. Классификация методов
5. Мезофизика. Особенности физики наносостояния.
6. Роль поверхности наночастиц . Общая характеристика наносостояния.
7. Особенности поверхности наночастиц и ее влияние на физ. свойства
8. Уникальные оптические свойства наноструктур
9. Уникальные механические свойства наноструктур
10. перспективы молекулярной наноэлектроники и спинтроники
11. Основные термины и определения нанотехнологий
12. История развития нанотехнологии
13. Классификация наноматериалов и их функции
14. Мезофизика. Особенности физики наносостояния.
15. Уникальные поверхностные свойства наночастиц
16. Размерные эффекты
17. Виды наночастиц и наноматериалов
18. Классификация методов моделирования наноматериалов
19. Численные и физические методы

Раздел 2 Моделирование материалов на различных уровнях организации материи

20. Особенности моделирования наноматериалов на макроскопическом, молекулярном и квантовом уровне
21. Моделирование наносистем на макроуровне
22. Фазовые равновесия и статистические равновесные термодинамические модели систем наночастиц.

23. Влияние размера частиц на фазовое равновесие.
24. Методы моделирования с использованием идей неравновесной термодинамики.
25. Моделирование процессов переноса с участием наночастиц
26. Влияние размерных эффектов на физико-химические свойства тел.
27. Зависимость диэлектрической проницаемости и ширины зоны проводимости наноматериалов от размера частиц.
28. Определение наноструктуры с позиции физики и химии твердого тела.
29. Потенциал Гиббса- Гельмгольца образования кластеров и наночастиц.
30. Термодинамика нанокластеров.
31. Зависимость температуры плавления от размера наночастиц.
32. Значение поверхностного натяжения на границах поверхности наноматериалов.
33. Транспортные явления, процессы переноса импульса, тепла , зарядов и массы в низкоразмерных системах.

Моделирование наноматериалов на квантовом уровне

34. Одномерные модели наноматериалов
35. Электронные состояния в трехмерных, двумерных, одномерных структурах.
36. Моделирование туннельных эффектов в наноструктурах.
37. Модели построенные на теории молекулярных орбиталей.
38. Теория молекулярных орбиталей (МО), и теоретические методы оценки электронной структуры молекул методы МО-ЛКАО, Методы Хартри Фока,
39. Методы теории функционала плотности Коэна- Шема.
40. МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ
41. Использование классических МО и кристаллических МО (функций Блоха) в молекулярной наноэлектронике.
42. Особенности моделирования электронной структуры линейных и квазилинейных (цепочечных) молекул.
43. Использование классических МО и кристаллических МО (функций Блоха) в молекулярной наноэлектронике.
44. Методы моделирования твердых тел Использование классических МО и кристаллических МО (функций Блоха) в молекулярной наноэлектронике.
45. Особенности моделирования электронной структуры линейных и квазилинейных (цепочечных) молекул.

Моделирование наноматериалов на молекулярном уровне

46. Метод молекулярной динамики
47. Задачи оптимизации геометрии
48. Матрица Гессе и ее свойства

49. Градиентные методы оптимизации
50. Алгоритм Девидона- Флечера- Пауэлла
51. Алгоритм Верле
52. Термостаты в методе молекулярной динамики
53. Построение топологических карт энергии молекул и наночастиц
54. Корреляционные конформационные функции и учет эргодичности
55. Моделирование геометрии и механических свойств наночастиц на основе фуллеренов,
56. Моделирование геометрии и свойств квантовых точек и нанотрубок
57. Моделирование метаматериалов ,
58. Моделирование фотонных кристаллов ,
59. Магнитные кластеры и полимеры.
60. Спиновые эффекты электронов и ядер в парамагнитных наноматериалах.
61. Ферромагнетики на основе замещенных радикал- полимеров.
62. Органический ферромагнетизм

6.4. Типовые задачи, предлагаемы на семинарских занятиях и контрольных

На контрольных работах рассматриваются вопросы указанные в перечне основной литературы.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература

1. М.Ю. Доломатов Методы моделирования в наноматериалах. Учебное пособие. – Уфа : РИНЦ Баш. ГУ-2015, 206с.
2. Доломатов М.Ю., Бахтизин Р.З. Исследование молекулярной и электронной структуры молекул и наночастиц. Лабораторный практикум по физическим основам наноэлектроники / Учебное пособие для студентов физических специальностей Вузов - Уфа: РИО БашГУ, 2012.- 120 с.
3. М.Ю. Доломатов, Р.З. Бахтизин , Д.О. Шуляковская Исследования электронных характеристик и свойств молекул и наночастиц. Учебное пособие. – Уфа : РИНЦ Баш. ГУ-2014, 214 с.

Дополнительная литература

1. Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направления исследований / Под ред. М. К. Роко, Р. С. Вильямса, П. Аливисатоса; Пер.с англ. под ред. Р.А.Андриевского. — М,: Мир, 2002. — 292 с.
2. Ч. Пул, Ф. Оуэнс. Нанотехнологии. Мир материалов и технологий. Техносфера, Москва, 2005.

3. Суздаев И. Л., Суздаев П. И. Нанокластеры и нанокластерные системы. Организация, взаимодействие, свойства // Успехи химии. — 2001. — Т. 70.-№3.-С. 203-240.
4. Чеботин В.Н. Физическая химия твердого тела. М.: Химия, 1982. 320с.
5. Алферов Ж. И. Двойные гетероструктуры: концепция применения в физике, электронике и технологии. Нобелевская лекция по физике //Успехи физических наук. — 2002. — Т. 172. — № 9. — С. 1068 — 1086.
6. Киселев В. Ф., Козлов С.Н., Зотеев А. В. Основы физики поверхности твердого тела. — М.: Изд-во МГУ, 1999. — 284 с.
7. Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы /Пер. с англ. под ред. В. В. Власова, А. А. Варнека. — Новосибирск: Наука, 1998.-334 с.
8. Морохов И. Д., Трусов Л. И., Лаповок В. Н. Физические явления в ультрадисперсных средах. — М.: Энергоатомиздат, 1984. — 224 с.
9. Глезер А. М. Аморфные и нанокристаллические структуры: сходства, различия, взаимные переходы // Российский химический журнал. — 2002. - Т. 46. -№ 5. - С. 50-56.
10. Мильвидский М. Г., Чельшев ВВ. Наноразмерные кластеры в полупроводниках — новый подход к формированию свойств материалов // Физика и техника полупроводников. — 1998. — Т. 32, — № 5. — С. 513 — 530.
11. Озерин А. И. Наноструктуры в полимерах: получение, структура, свойства // Проблемы и достижения физико-химической и инженерной науки в области наноматериалов: Труды 7-й сессии / Под ред. В. А. Махлина. - М.: ГНЦ РФ НИФХИ им. Л.Я. Карпова, 2002. - Т. 1. - С. 186-204.
- 12.Помогайло А.Д., Розенберг А.С., Уфлянд И.Е. Наночастицы металлов в полимерах. М.: Химия, 2000.
13. Помогайло А. Д. Металлополимерные нанокомпозиты с контролируемой молекулярной архитектурой // Российский химический журнал. —2002. - Т. 46. -№ 5. - С. 64-73.
14. Симон Ж., Андре Ж. "Молекулярные полупроводники". М.: Мир, 1988.
- 15.У.А.Харрисон. "Электронная структура и свойства твердых тел". М.: Мир, 1986.
- 16.Рамбиди А.Г. "Принципы молекулярной электроники". Поверхность, 2006, №8, с.1.
- 17.Колпаков А.В. "Дифракция рентгеновских лучей в сверхрешетках", 1992.
- 18.Хорман М. "Полупроводниковые сверхрешетки". М.: Наука, 2009.
- 19.Елецкий А.В. "Углеродные нанотрубки". Успехи физических наук, 1997, вып.9, с.945.

20. Лозовик Ю.Е., Попов А.М. "Образование и рост углеродных наноструктур – фуллеренов, наночастиц, нанотрубок и конусов". Успехи физических наук, 1997, вып.7, с.751.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть «Интернет»), необходимых для освоения дисциплины

1. О. П. Кормилицын, Ю. А. Шукейло . Механика материалов и структур нано- и микротехники [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Электрон. дан. и прогр. — М. : Академия, 2008 .—— Электрон. версия печ. публикации .— Систем. требования: IBM PC; Microsoft Windows 95/98/XP. ISBN978-5-7695-4093-6 URL:

<http://https://bashedu.bibliotech.ru/Account/LogOn>>.

2. Перст .перспективные нанотехнологии . Наноструктуры, сверхпроводники, фуллерены Экспресс-бюллетень ПерстТ издается совместной информационной группой ИФТТ РАН и РНЦ «Курчатовский институт» <http://perst.issp.ras.ru>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Основные темы дисциплины «Методы моделирования в наноматериалах» приведены в таблице 4 рабочего плана, где можно ознакомиться с расшифровкой каждой темы и основными понятиями, которые необходимо освоить по каждому модулю. В этой же таблице подробно прописана тематика самостоятельной работы с указанием литературных источников. По каждой теме самостоятельной работы в рабочей программе указаны соответствующие параграфы основной и дополнительной литературы, которая есть в достаточном количестве в библиотеке. Рекомендуется активно пользоваться электронными ресурсами библиотеки читального зала физико-технического института.

Приступая к изучению предмета, необходимо ознакомиться с учебной программой курса ММН.

Каждый раздел и подраздел курса должен быть в процессе изучения кратко законспектирован.

После проработки каждого раздела курса по конспектам лекций и по рекомендованным учебным пособиям необходимо ответить на контрольные вопросы, помещенные в конце каждой темы учебного пособия.

По каждому из разделов лекционного материала студенты выполняют лабораторную работу, в которой они должны показать следующие результаты:

- отчет по каждой лабораторной работе защищается студентом;

- во время защиты студент должен продемонстрировать понимание всех

методических подходов, связанных с выполнением данной лабораторной работы;

- полученные численные и графические результаты должны быть кратко описаны в тексте отчета и в выводах;

- при выполнении лабораторных работ студент должен проявить понимание теоретических предпосылок для решения данного конкретного задания, обоснованно выбрать метод решения, максимально использовать доступные компьютерные программы.

Самостоятельное изучение материала предусмотрено в каждом разделе дисциплины. Объем самостоятельно изучаемого теоретического материала не превышает 10 % от материала, изученного на лекциях. Значительная часть самостоятельной работы студентов связана с написанием и защитой практической работы, с подготовкой к выполнению лабораторных работ, к оформлению отчетов по лабораторным работам, с решением задач, с ответами на вопросы по соответствующим разделам дисциплины.

Контроль выполнения самостоятельной работы осуществляется в виде приемки отчетов по лабораторным работам, защиты практических работ, проверки конспектов по проработке отдельных разделов курса.

Лабораторные занятия требуют предварительной подготовки. Получив у преподавателя тему работы необходимо: проработать теоретический материал по данной работе (лекционный либо по учебной литературе); спланировать выполнение лабораторной работы: четко уяснить порядок выполнения работы, подготовить таблицы для записи полученных результатов, продумать возможности снижения систематических и случайных ошибок. Перед выполнением работы необходимо сдать допуск преподавателю. После снятия результатов и их обработки с учетом теории погрешности, нужно проанализировать полученные результаты, сформулировать вывод и подготовить контрольные вопросы, которые приведены в конце работы. Ниже перечислена тематика лабораторных работ:

1. Моделирование молекулярной структуры и энергии образования дефектов в графите методом молекулярной динамики. №1
2. Моделирование электронного строения молекул полициклических органических полупроводников Моделирование ИК и УФ спектра полициклических молекул. №2
3. Моделирование взаимодействия наночастиц с растворителем методом молекулярной динамики. №3
4. Моделирование механических свойств полимерных материалов методом групповых инкрементов. №4
5. Моделирование оптических свойств полимерных материалов методом групповых инкрементов. №5
6. Моделирование электрофизических и тепловых свойств полимерных материалов методом групповых инкрементов. №6
7. Моделирование электронной и молекулярной структуры

метаматериала. №7

8. Моделирование микро и макроскопических свойств наноматериала. №8

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

В соответствии с современными требованиями ФГОС ВО в самостоятельной и практической работе студентов применяются компьютерные технологии, при этом происходит активное усвоение навыков программирования. Студенты привлекаются к разработке новых практических работ по исследованию постоянно обновляющейся элементной базы современной микро и наноэлектроники. В качестве средства для проведения занятий используются электронные технологии и виртуальные среды. Активному усвоению тематического материала способствует самостоятельная работа с литературой при подготовке к лабораторным и практическим работам в группах по 2-3 студента. В планах практических работ – освоение вычислительной техники проводится знакомство с основами автоматизации нанотехнологических процессов в которых широко применяются современные компьютерные ИТ. Наиболее активные студенты привлекаются к разработке реальных моделей и прдуктов программного обеспечения. Лабораторные и практические работы выполняются в , программно-аппаратной среде HyperChem 8, Maple. Студенты обучаются программированию и навыкам разработки трехмерных моделей наноустройств .

Компьютеры кафедры имеют выход в международные и российские информационные сети:

- Доступ к электронно-библиотечной системе «Айбукс». Пользователи университетских компьютеров могут просматривать и читать самые современные учебники и пособия по основным учебным дисциплинам, а также копировать фрагменты текста.

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для проведения лекционных занятий используется аудиторный фонд физико-технического института.

Лабораторные занятия проводятся в специализированной лаборатории физико-технического института (313 кабинет). Практические работы по данной дисциплине обеспечены необходимыми ЭВМ для проведения занятий как минимум для 5 групп из 2-3 студентов. На кафедре и факультете имеется достаточное количество единиц вычислительной техники и программного обеспечения, которые постоянно пополняются, обновляются и позволяют повысить качество подготовки студентов.

При изучении курса «Моделирование в наноматериалах», используется следующее программное обеспечение: Linux, Windows, Open Office, Office 2007, Adobe Photoshop, Adobe Acrobat, Corel Draw, Paint, Photo Editor, Power Point. Изучение дисциплины сопровождается базовым программным обеспечением: HyperChem 8, Maple 16.