

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ИНСТИТУТ ЛАЗЕРНЫХ И ПЛАЗМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
КАФЕДРА ЛАЗЕРНЫХ МИКРО- И НАНОТЕХНОЛОГИЙ

ОДОБРЕНО НТС ИФИБ

Протокол № 5/25
от 18.11.2025

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, РАСЧЕТ И ПРОЕКТИРОВАНИЕ НАНОСИСТЕМ

Направление подготовки
(специальность)

[1] 03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/ В	СРС, час.	КСР, час.	Форма(ы) контроля, экз./зач./КР/КП
9	2	72	16	32	0		24	0	3
Итого	2	72	16	32	0		24	0	

АННОТАЦИЯ

В курсе рассматриваются современные методы численного моделирования и расчета свойств наносистем с применением высокопроизводительных компьютеров. Основное внимание уделяется формированию теоретических знаний в области квантовомеханических методов расчета систем различной пространственной размерности, а также умению применять полученные знания к описанию свойств и проектированию электронных и оптических приборов на их основе. Приводятся примеры применения широко распространенных программных пакетов с открытым исходным кодом, в том числе с использованием кластерных суперкомпьютеров.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели курса: формирование у студентов знаний в области квантовомеханических методов расчета систем различной пространственной размерности, а также умений применять полученные знания к описанию свойств и проектированию электронных и оптических приборов на их основе

Задача курса состоит в том, чтобы студент имел представление о современных квантовомеханических методах численного моделирования наноструктур, а также умел применять их для расчета свойств наноматериалов и проектирования электронных и оптических приборов на их основе с заданными характеристиками.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

«Компьютерное моделирование, расчет и проектирование наносистем» - учебная дисциплина о применении теоретических положений к описанию свойств наноструктур с использованием современных численных методов моделирования. Раскрывает общие для всех наносистем закономерности образования и изменения физико-химических свойств в зависимости от типа наноструктур и пространственной размерности.

Представляет собой дисциплину цикла профессиональных учебных дисциплин, вариативной ее части. Базируется на курсах атомной физики, физики наноразмерных систем, квантовой механики, основ математического анализа, информатики.

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
--------------------------------	--

Профессиональные компетенции в соответствии с задачами и объектами (областями знаний) профессиональной деятельности:

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	Объект или область знания	Код и наименование профессиональной компетенции;	Код и наименование индикатора достижения
--	---------------------------	--	--

		Основание (профессиональный стандарт-ПС, анализ опыта)	профессиональной компетенции
научно-исследовательский			
<p>- выявление актуальных проблем и тенденций в области физики - работа с научной литературой, в том числе с использованием информационных технологий, отслеживание отечественных и зарубежных работ в исследуемой области</p> <p>- выбор методов, современной аппаратуры и информационных технологий для проведения исследования - проведение теоретических и экспериментальных исследований</p>	<p>физические объекты и системы различного масштаба, уровня организации, физические явления и процессы, физические, инженерно-физические, биофизические технологии, методы, приборы, устройства</p>	<p>ПК-3 [1] - Способен самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта</p> <p><i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011</p>	<p>З-ПК-3 [1] - знать методы проведения научных исследований и выполнения опытно-конструкторских работ в области физики</p> <p>У-ПК-3 [1] - уметь самостоятельно формулировать цели, ставить задачи научных исследований в своей профессиональной сфере; решать физические задачи с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта</p> <p>В-ПК-3 [1] - владеть навыками работы на современной аппаратуре, оборудовании; навыками использования информационных технологий в своей профессиональной области</p>
<p>- выявление актуальных проблем и тенденций в области физики - работа с научной литературой, в том числе с использованием информационных технологий,</p>	<p>физические объекты и системы различного масштаба, уровня организации, физические явления и процессы, физические, инженерно-физические,</p>	<p>ПК-1.2 [1] - Способен применять на практике знания лазерной физики, физики полупроводников, оптики, физических основ взаимодействия излучения с веществом для качественного и</p>	<p>З-ПК-1.2 [1] - Знать законы и принципы физики твердого тела, оптики, взаимодействия излучения с веществом, квантовой механики, лазерной физики</p>

<p>отслеживание отечественных и зарубежных работ в исследуемой области</p> <p>- выбор методов, современной аппаратуры и информационных технологий для проведения исследования - проведение теоретических и экспериментальных исследований</p>	<p>биофизические технологии, методы, приборы, устройства</p>	<p>количественного описания исследуемых объектов и явлений</p> <p><i>Основание:</i> Профессиональный стандарт 40.039, 40.037, 40.006</p>	<p>У-ПК-1.2 [1] - Уметь формулировать, выделять, анализировать исходные данные об исследуемом объекте и явлении, исходя из законов и принципов физики твердого тела, оптики, взаимодействия излучения с веществом, квантовой механики, лазерной физики</p> <p>В-ПК-1.2 [1] - Владеть приемами и методами, используемыми в области физики твердого тела, оптики, взаимодействия излучения с веществом, квантовой механики, лазерной физики, для качественного и количественного описания исследуемых объектов и явлений</p>
<p>- выявление актуальных проблем и тенденций в области физики - работа с научной литературой, в том числе с использованием информационных технологий, отслеживание отечественных и зарубежных работ в исследуемой области</p> <p>- выбор методов, современной аппаратуры и информационных технологий для проведения</p>	<p>физические объекты и системы различного масштаба, уровня организации, физические явления и процессы, физические, инженерно-физические, биофизические технологии, методы, приборы, устройства</p>	<p>ПК-1.3 [1] - Способен ставить и решать теоретические и экспериментальные задачи в области физики конденсированного вещества, фотоники, физики лазеров, полупроводниковой физики, взаимодействия излучения с веществом</p> <p><i>Основание:</i> Профессиональный стандарт 40.039, 40.037</p>	<p>З-ПК-1.3 [1] - Знать теоретические и аналитические модели и основные приемы проведения эксперимента в области физики конденсированного вещества, фотоники, физики лазеров, полупроводниковой физики, взаимодействия излучения с веществом</p> <p>У-ПК-1.3 [1] - Уметь формулировать задачи исследования в области физики конденсированного</p>

исследования - проведение теоретических и экспериментальных исследований			вещества, фотоники, физики лазеров, полупроводниковой физики, взаимодействия излучения с веществом, выбирать подходящие модели, экспериментальные приемы и методы исследования В-ПК-1.3 [1] - Владеть навыками анализа полученных результатов, формулирования выводов, корректировки дальнейшего плана исследования в области физики конденсированного вещества, фотоники, физики лазеров, полупроводниковой физики, взаимодействия излучения с веществом
--	--	--	--

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Профессиональное воспитание	- формирование психологической готовности к профессиональной деятельности по избранной профессии (В15)	Использование воспитательного потенциала дисциплин общепрофессионального модуля для: - формирования устойчивого интереса к профессиональной деятельности, потребности в достижении результата, понимания функциональных обязанностей и задач избранной профессиональной деятельности, чувства профессиональной ответственности через выполнение учебных, в том числе практических заданий, требующих строгого соблюдения правил техники безопасности и инструкций по

		работе с оборудованием в рамках лабораторного практикума.
Профессиональное воспитание	- формирование научного мировоззрения, культуры поиска нестандартных научно-технических/практических решений, критического отношения к исследованиям лженаучного толка (В19)	<p>1.Использование воспитательного потенциала дисциплин/практик «Научно-исследовательская работа», «Проектная практика», «Научный семинар» для:</p> <ul style="list-style-type: none"> - формирования понимания основных принципов и способов научного познания мира, развития исследовательских качеств студентов посредством их вовлечения в исследовательские проекты по областям научных исследований. <p>2.Использование воспитательного потенциала дисциплин "История науки и инженерии", "Критическое мышление и основы научной коммуникации", "Введение в специальность", "Научно-исследовательская работа", "Научный семинар" для:</p> <ul style="list-style-type: none"> - формирования способности отделять настоящие научные исследования от лженаучных посредством проведения со студентами занятий и регулярных бесед; - формирования критического мышления, умения рассматривать различные исследования с экспертной позиции посредством обсуждения со студентами современных исследований, исторических предпосылок появления тех или иных открытых и теорий.
Профессиональное воспитание	Формирование культуры информационной безопасности (В23)	Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирование базовых навыков информационной безопасности через изучение последствий халатного отношения к работе с информационными системами, базами данных (включая персональные данные), приемах и методах злоумышленников, потенциальном уроне пользователям.

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Разделы учебной дисциплины, их объем, сроки изучения и формы контроля:

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практ. (семинары)/ Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	<i>9 Семестр</i>						
1	Первый раздел	1-8	8/16/0		25	КИ-8	3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3, 3-ПК-1.2, У-ПК-1.2, В-ПК-1.2, 3-ПК-1.3, У-ПК-1.3, В-ПК-1.3,
2	Второй раздел	9-16	8/16/0		25	КИ-16	3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3, 3-ПК-1.2, У-ПК-1.2, В-ПК-1.2, 3-ПК-1.3, У-ПК-1.3, В-ПК-1.3,
	<i>Итого за 9 Семестр</i>		16/32/0		50		
	Контрольные мероприятия за 9 Семестр				50	3	3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3, 3-ПК-1.2, У-ПК-1.2, В-ПК-1.2, 3-ПК-1.3, У-ПК-1.3, В-ПК-1.3,

* – сокращенное наименование формы контроля

** – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

Обозначение	Полное наименование
КИ	Контроль по итогам
Э	Экзамен

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
	<i>9 Семестр</i>	16	32	0
1-8	Первый раздел	8	16	0
1	Введение Укажите название пункта - Актуальность моделирования и проектирования наносистем - Понятие моделирования. Выбор модели. Области применения. Эмпирические модели. Модели из первых принципов. Наноструктуры. Особенности моделирования наноструктур. Точные и приближенные решения. - Компьютерное моделирование. Роль компьютеров. Вычислительные методы. Виды компьютеров. Роль юникс-подобных операционных систем в моделировании	Всего аудиторных часов 2 4 0 Онлайн 0 0 0		
2 - 3	Квантовомеханические и классические модели - Классификация моделей - Модели, основанные на классической механике. Области применения. Положительные и отрицательные стороны. - Модели, основанные на квантовой теории. Области применения. Преимущества перед классическими методами. Недостатки моделей	Всего аудиторных часов 2 4 0 Онлайн 0 0 0		
4 - 6	Вычислительные средства - 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. - Использование юникс-подобных операционных систем. Основы работы. Удаленное управление. Установка, компиляция и запуск расчетных задач. Особенности работы на кластерных суперкомпьютерах	Всего аудиторных часов 2 4 0 Онлайн 0 0 0		
7 - 8	Метод молекулярной динамики - Основы метода - Область применения - Частоты собственных колебаний. Оптимизация структуры - Реализация на классических и суперкомпьютерах	Всего аудиторных часов 2 4 0 Онлайн 0 0 0		
9-16	Второй раздел	8	16	0
9 - 10	Введение в квантовомеханические методы моделирования - Введение, основные особенности - Уравнение Шредингера, квантование	Всего аудиторных часов 2 4 0 Онлайн 0 0 0		

	<ul style="list-style-type: none"> - Кристаллы, закон дисперсии, наноструктуры - Оптические и электронные свойства наноматериалов 			
11 - 12	Основные подходы <ul style="list-style-type: none"> - Одноэлектронное приближение - Самосогласованное поле - Модель сильной связи - Особенности моделирования наноструктур. Метод сверхячейки. - Модель складывания зоны 	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		0	0	0
13 - 14	Метод функционала электронной плотности <ul style="list-style-type: none"> - Теоретические основы метода - Практическая реализация - Разложение электронной волновой функции в базисе плоских волн и молекулярных орбиталей - Метод псевдопотенциала 	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		0	0	0
15 - 16	Программные продукты для моделирования наносистем <ul style="list-style-type: none"> - Обзор программных пакетов, используемых для расчета и проектирования наносистем - Программный комплекс Avogadro. Конструирование наносистем. Оптимизация геометрий. Экспорт и импорт данных в другие системы. - Программный пакет с открытым исходным кодом Quantum Espresso. 	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		0	0	0

Сокращенные наименования онлайн опций:

Обозначение	Полное наименование
ЭК	Электронный курс
ПМ	Полнотекстовый материал
ПЛ	Полнотекстовые лекции
ВМ	Видео-материалы
АМ	Аудио-материалы
Прз	Презентации
Т	Тесты
ЭСМ	Электронные справочные материалы
ИС	Интерактивный сайт

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При реализации программы дисциплины предусматривается использование в учебном процессе различных образовательных технологий с целью формирования и развития профессиональных навыков студентов. Аудиторные занятия (16 часов) предполагают применение на лекциях технических средств обучения (проектора-оверхеда, ПК и компьютерного проектора). Внеаудиторная работа в рамках самостоятельной работы студентов (18 часов) подразумевает работу над рефератом (обзором), встречи и консультации с преподавателями, экскурсии в учебно-исследовательские лаборатории.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонд оценочных средств по дисциплине обеспечивает проверку освоения планируемых результатов обучения (компетенций и их индикаторов) посредством мероприятий текущего, рубежного и промежуточного контроля по дисциплине.

Связь между формируемыми компетенциями и формами контроля их освоения представлена в следующей таблице:

Компетенция	Индикаторы освоения	Аттестационное мероприятие (КП 1)
ПК-3	З-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16
	У-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16
	В-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16
ПК-1.2	З-ПК-1.2	З, КИ-8, КИ-16
	У-ПК-1.2	З, КИ-8, КИ-16
	В-ПК-1.2	З, КИ-8, КИ-16
ПК-1.3	З-ПК-1.3	З, КИ-8, КИ-16
	У-ПК-1.3	З, КИ-8, КИ-16
	В-ПК-1.3	З, КИ-8, КИ-16

Шкалы оценки образовательных достижений

Шкала каждого контрольного мероприятия лежит в пределах от 0 до установленного максимального балла включительно. Итоговая аттестация по дисциплине оценивается по 100-балльной шкале и представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках текущего и промежуточного контроля.

Итоговая оценка выставляется в соответствии со следующей шкалой:

Сумма баллов	Оценка по 4-ех балльной шкале	Оценка ECTS	Требования к уровню освоению учебной дисциплины
90-100	5 – «отлично»	A	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
85-89	4 – «хорошо»	B	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
75-84		C	
70-74		D	
65-69	3 – «удовлетворительно»	E	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
60-64			
Ниже 60	2 – «неудовлетворительно»	F	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного

		материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.
--	--	--

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

Специальное программное обеспечение не требуется

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

<https://online.mephi.ru/>

<http://library.mephi.ru/>

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Для реализации дисциплины используются учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы. Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения – мультимедийным оборудованием. Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены рабочими местами, в том числе компьютерной техникой, с возможностью выхода в сеть «Интернет».

Автор(ы):

Осадчий Александр Валентинович, к.ф.-м.н.