

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Гаврилов Сергей Александрович

Должность: И.О. Ректора

Дата подписания: 30.04.2026 15:23:08

Уникальный программный ключ:

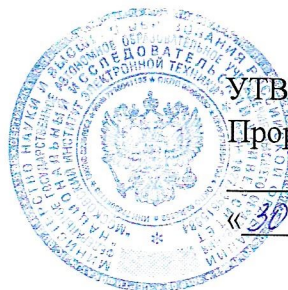
f17218015d82e3c1457d1df9e244def505047355

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

«Национальный исследовательский университет

«Московский институт электронной техники»



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

А.Г. Балашов

«30» августа 2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

«Моделирование свойств и структуры наноматериалов»

Направление подготовки - 11.04.04 «Электроника и нанoeлектроника»

Направленность (профиль) – «Материалы и технологии микро- и нанoeлектроники»

Москва 2025

1. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

Дисциплина участвует в формировании следующей компетенции образовательной программы:

Компетенции ОП	Подкомпетенции, формируемые в дисциплине	Индикаторы достижения компетенций/подкомпетенций
ОПК-4. Способен разрабатывать и применять специализированное программно-математическое обеспечение для проведения исследований и решения инженерных задач	ОПК-4.МССНм Способен на основе анализа научно-технической информации, отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования проводить атомистическое моделирование свойств материалов и наноструктур	Знает фундаментальные принципы теории функционала плотности (DFT), основы метода молекулярной динамики (МД), формализм подхода Ландауэра и метода неравновесных функций Грина (NEGF) для описания квантового транспорта в наноразмерных системах. Умеет проводить с использованием DFT-пакетов расчеты основных свойств материалов: равновесная геометрия, полная энергия, электронная структура (зонная, плотность состояний), колебательные частоты; умеет выполнять молекулярно-динамическое моделирование для исследования термической стабильности, фазовых переходов, механических и транспортных свойств наноматериалов. Имеет опыт комплексного исследования наноматериалов: от DFT-оптимизации структуры и МД-анализа динамической стабильности до расчета транспортных свойств методом неравновесных функций Грина.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Дисциплина входит в обязательную часть Блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы.

Входные требования к дисциплине - необходимы компетенции в области электротехники, теории вероятностей и статистики, наноэлектроники, квантовой механики:

- знание основ теории квантового транспорта;
- умение использовать математические модели для обработки экспериментальных данных.
- навык вычисления характеристик положения и числовых характеристик случайных величин, выборок.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Курс	Семестр	Общая трудоёмкость (ЗЕ)	Общая трудоёмкость (часы)	Контактная работа			Самостоятельная работа (часы)	Промежуточная аттестация
				Лекции (часы)	Лабораторные работы (часы)	Практические занятия (часы)		
1	2	3	108	16	16	-	76	Зачет

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

№ и наименование модуля	Контактная работа			Самостоятельная работа	Формы текущего контроля
	Лекции	Лабораторные работы (часы)	Практические занятия (часы)		
1. Моделирование молекулярной динамики	8	8	-	32	Опрос Защита лабораторных работ №1-4
2. Моделирование квантового транспорта	8	8	-	44	Опрос Защита лабораторных работ № 5-8 Сдача индивидуального задания

4.2. Лекционные занятия

№ модуля дисциплины	№ лекции	Объем занятий (часы)	Краткое содержание
1	1	2	Введение в атомистическое моделирование материалов. Основные принципы и задачи моделирования на атомарном уровне. Классификация методов: квантово-механические, полуэмпирические, классические. Применение в нанoeлектронике: от материалов до устройств.
	2	2	Теория функционала плотности (DFT): основы и математический аппарат.

			Теоремы Хохенберга-Кона и уравнения Кона-Шема. Обменно-корреляционные функционалы (LDA, GGA, гибридные). Расчет электронной структуры и оптимизация молекулярной геометрии.
	3	2	Оптимизация молекулярной структуры и расчет свойств материалов. Методы минимизации энергии Расчет колебательных спектров (ИК, Раман) и термодинамических характеристик Примеры применения для двумерных материалов и молекулярных систем
	4	2	Метод молекулярной динамики (МД): классические подходы. Основы МД: силовые поля, уравнения движения, термостаты и баростаты. Моделирование фазовых переходов, диффузии и механических свойств. Ограничения классической МД и способы их преодоления.
2	5	2	Моделирование квантового транспорта в наноструктурах. Подход Ландауэра и метод неравновесных функций Грина (NEGF). Расчет вольт-амперных характеристик наноструктур (молекулярные контакты, квантовые точки). Примеры для 2D материалов, углеродных нанотрубок и молекулярных переходов.
	6	2	Расчет термоэлектрических свойств материалов. Ключевые параметры: коэффициент Зеебека, электропроводность, теплопроводность, добротность Методы расчета электронного и фононного транспорта Термоэлектрические эффекты в УНТ с изотопным легированием
	7	2	Моделирование наноразмерных диодов и полевых транзисторов. Моделирование р-п переходов, контактов металл-полупроводник и каналов транзисторов DFT для интерфейсных состояний, NEGF для квантового транспорта, классическая МД для тепловых эффектов Оптимизация характеристик молекулярных диодов, проектирование полевых транзисторов на основе 2D-материалов
	8	2	Многомасштабное моделирование в наноэлектронике. Связь DFT, МД и методов моделирования переноса. Моделирование гетероструктур и интерфейсов в устройствах. Примеры: полевые транзисторы, мемристоры, сенсоры. Моделирование деформаций, механических и электронных свойств полимеров и 2D-материалов (графен, MoS ₂ , h-BN). Дизайн гибких сенсоров, растяжимых проводников, органических транзисторов.

4.1. Практические занятия

Не предусмотрены

4.3. Лабораторные работы

№ модуля дисциплины	№ лабораторной работы	Объем занятий (часы)	Наименование работы
1	1	2	Знакомство с QuantumATK: Расчет зонной структуры и плотности электронных состояний полупроводниковых кристаллов Построение кристаллической структуры в Builder. Расчет электронной структуры методом функционала плотности. Визуализация зонной диаграммы и плотности состояний. Сравнение с экспериментальными данными.
	2	2	Моделирование молекул и наноструктур полуэмпирическими методами: Расчет энергетических уровней молекулы бензола. Оптимизация геометрии графеновой наноленты методом DFTB. Оценка динамической устойчивости структур Сравнение точности и скорости расчетов с DFT.
	3	2	Диффузия атомов и термодинамические свойства наноструктур: Моделирование диффузии атомов Расчет коэффициента диффузии по среднеквадратичному смещению (MSD). Метод эластичной ленты.
	4	2	Термоэлектрические свойства наноструктур: Расчет коэффициента Зеебека, электро- и теплопроводности (NEGF+DFT). Оптимизация термоэлектрической добротности ZT путем легирования.
2	5	2	Упругие и вязкоупругие свойства: Моделирование деформации методом молекулярной динамики. Определение модуля Юнга и предела прочности. Модели вязкоупругости.
	6	2	Влияние адсорбции атомов на проводимость 2d материалов, графена и нанолент: Расчет плотности состояний и транспортных характеристик Анализ перехода металл-полупроводник.
	7	2	Ван-дер-ваальсовы гетероструктуры для оптоэлектроники: Построение и оптимизация ван-дер-ваальсовых гетероструктур Расчет межслоевого зарядового переноса и оптического

			поглощения.
	8	2	Полевой нанотранзистор: Моделирование полевого транзистора методом NEGF-DFT. Построение передаточных характеристик (I - V_g) и вычисление порогового напряжения.

4.4. Самостоятельная работа студентов

№ модуля дисциплины	Объем занятий (часы)	Вид СРС
1	12	Изучение материалов лекций. Подготовка к опросам
	20	Подготовка к лабораторным работам: теоретическая подготовка, составление плана работы, моделирование физических процессов, анализ полученных данных; составление отчета о выполнении лабораторной работы.
2	12	Изучение материалов лекций. Подготовка к опросам
	20	Подготовка к лабораторным работам: выполнение ДЗ и подготовка конспекта.
	12	Выполнение индивидуального задания. Подготовка к его сдаче.

4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Не предусмотрены

5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы студентов в составе УМК дисциплины (ОРИОКС, <http://orioks.miet.ru/>):

Сценарий обучения по дисциплине

Модуль 1 «Моделирование молекулярной динамики»

- ✓ Материалы лекций для подготовки к опросам
- ✓ Лабораторный практикум

Модуль 2 «Моделирование квантового транспорта»

- ✓ Материалы лекций для подготовки к опросам
- ✓ Лабораторный практикум
- ✓ Методические рекомендации по выполнению индивидуального задания

6. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

Литература

1. Бордовский, Г. А.. Физические основы математического моделирования : учебник и практикум для вузов / Г. А. Бордовский, А. С. Кондратьев, А. Чоудери. - 2-е изд., испр. и доп. - Москва : Юрайт, 2025. - 319 с. - (Высшее образование). - URL:

- <https://urait.ru/bcode/561986> (дата обращения: 28.07.2025). - ISBN 978-5-534-05365-4. - Текст : электронный.
2. Нанoeлектроника : теория и практика : Учебник / В.Е. Борисенко, А.И. Воробьева, Е.А. Уткина, А.Л. Данилюк. - 7-е изд., электронное издание. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2025. - 369 с. - (Учебник для высшей школы). - URL: <https://e.lanbook.com/book/451532> (дата обращения: 23.07.2025). - ISBN 978-5-93208-770-1. - Текст : электронный.
 3. Механизмы транспорта и полевой эмиссии электронов в 2D некристаллических углеродных гетероструктурах с квантовым барьером / Г. Я. Красников, В. П. Бокарев, Г. С. Теплов, Р. К. Яфаров. - Текст : электронный // МИКРОЭЛЕКТРОНИКА. - Москва : ИКЦ Академкнига, 2024. - № 5. - С. 389-396. - URL: <https://eivis.ru/browse/article/102440550/viewer?udb=12> (дата обращения: 11.06.2025). - Режим доступа: подписка МИЭТ.
 4. Игнатов, А. Н. Микросхемотехника и нанoeлектроника : учебное пособие / А. Н. Игнатов. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 528 с. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - URL: <https://e.lanbook.com/book/210695> (дата обращения: 25.04.2024). - ISBN 978-5-8114-1161-0. - Текст : электронный.
 5. Петров, М. Н. Моделирование компонентов и элементов интегральных схем : учебное пособие / М. Н. Петров, Г. В. Гудков. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 464 с. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - URL: <https://e.lanbook.com/book/175507> (дата обращения: 11.05.2023). - ISBN 978-5-8114-8371-6. - Текст : электронный.

Периодические издания

1. RUSSIAN MICROELECTRONICS. - : Springer, [2000] - . - URL: <http://link.springer.com/journal/11180>(дата обращения: 30.02.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей МИЭТ
2. Известия вузов. Электроника : Научно-технический журнал / М-во образования и науки РФ; МИЭТ; Гл. ред. Ю.А. Чаплыгин. - М. : МИЭТ, 1996 - .
3. IEEE Transactions on Electron Devices. - USA : IEEE, [б.г.]. - URL: <http://ieeexplore.ieee.org/xpl/RecentIssue.jsp?punumber=16> (дата обращения: 14.02.2025). - Режим доступа: по подписке МИЭТ
4. Электроника: Наука. Технология. Бизнес : Научно-технический журнал / Издается при поддержке Российского агентства по системам управления. - М. : Техносфера, 1996 - .

7. ПЕРЕЧЕНЬ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ БАЗ ДАННЫХ, ИНФОРМАЦИОННЫХ СПРАВОЧНЫХ СИСТЕМ

1. eLIBRARY.RU : Научная электронная библиотека : сайт. - Москва, 2000 - . - URL: <https://elibrary.ru/defaultx.asp> (дата обращения: 30.02.2025). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей

8. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В ходе реализации обучения используются традиционное обучение,

Освоение образовательной программы обеспечивается ресурсами электронной информационно-образовательной среды ОРИОКС(<http://orioks.miet.ru>).

В ходе реализации обучения используется также «расширенная виртуальная модель», которая предполагает обязательное присутствие студентов на очных учебных занятиях или онлайн-занятиях, на которых проводится разбор нового материала, консультирование и опрос по результатам выполнения самостоятельной работы. Самостоятельная работа студентов включает работу с использованием онлайн-ресурсов, в т.ч. для организации обратной связи с обсуждением, консультированием, с последующей доработкой и подведением итогов.

Для взаимодействия студентов с преподавателем используются сервисы обратной связи: раздел ОРИОКС «Новости», «Домашние задания», электронная почта.

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование учебных аудиторий и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность учебных аудиторий и помещений для самостоятельной работы	Перечень программного обеспечения
Учебная аудитория	Мультимедийное оборудование	OC Microsoft Windows Microsoft Office
Компьютерный класс	Персональные компьютеры с доступом к ПО по атомистическому моделированию	Quantum ATK (Synopsys), LAMMPS, VASP
Помещение для самостоятельной работы	Компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду МИЭТ	OC Microsoft Windows Microsoft Office Professional Plus браузер Acrobatreader DC

10. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕРКИ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ

ФОС по подкомпетенции ОПК-4.МССНм «Способен на основе анализа научно-технической информации, отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования проводить атомистическое моделирование свойств материалов и наноструктур»

Фонд оценочных средств представлен отдельным документом и размещен в составе УМК дисциплины в электронной информационной образовательной среды ОРИОКС// URL: <http://orioks.miet.ru/>.

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

11.1. Особенности организации процесса обучения

В процессе обучения студенты должны осуществить поиск дополнительной информации по темам лекций в научных источниках (рекомендованных ПБД и ИСС) и подготовиться к опросам.

Приступать к лабораторным работам необходимо после изучения теоретического материала, рекомендованного преподавателем в рамках самостоятельной работы и изучения описания соответствующей лабораторной работы.

Для выполнения лабораторного практикума можно воспользоваться также разработками лабораторных работ, находящихся на кафедре. Студенты получают допуск к лабораторной работе после ознакомления с описанием лабораторной работы. Для получения допуска необходимо правильно ответить на контрольные вопросы к теоретической части, приведенные в конце описания лабораторной работы.

Текущий контроль самостоятельной работы студента осуществляется по результатам защит лабораторных работ, прохождения опросов, выполнения в срок домашнего индивидуального задания и участия в активных и интерактивных формах проведения занятий.

Для итоговой аттестации целесообразно использовать портфолио, включающий: конспект материалов, подготовленных в рамках самостоятельной работы, материалы лабораторных работ, материалы выполненного индивидуального задания. По завершении обучения проводится публичное представление результатов выполнения индивидуального задания: студенты выступают с докладами, излагая содержание проделанной работы, анализируя различные аспекты освещаемой проблемы, происходит обсуждение информации в формате научной дискуссии.

Наиболее сложные и проблемные вопросы курса могут быть разъяснены обучающимся во время очных консультаций и дистанционных консультаций с использованием современных коммуникационных платформ и электронной почты.

11.2. Система контроля и оценивания

Для оценки успеваемости студентов по дисциплине используется балльная накопительная система.

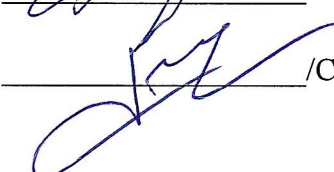
Баллами оцениваются: результаты опросов, защиты лабораторных работ и выполнение индивидуального задания (до 80 баллов) и промежуточная аттестация (до 20 баллов). По сумме баллов выставляется итоговая оценка по предмету. Структура и график контрольных мероприятий доступен в ОРИОКС, <http://orioks.miet.ru/>.

Разработчики:

Профессор Института ИнЭл, д.ф.-м.н.

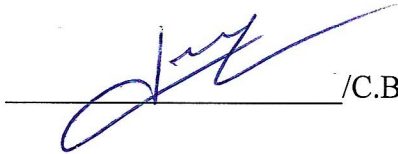
 / Р.Т. Сибатов/

Директор Института ПМТ, к.т.н.

 /С.В. Дубков/

Рабочая программа дисциплины «Моделирование свойств и структуры наноматериалов» по направлению подготовки 11.04.04 «Электроника и микроэлектроника», направленности (профилю) «Материалы и технологии микро- и нанoeлектроники» разработана в Институте ПМТ и утверждена на заседании Ученого совета Института 29 августа 2025 года, протокол № 23

Директор Института ПМТ

 /С.В. Дубков/

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

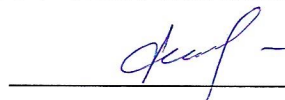
Рабочая программа согласована с Центром подготовки к аккредитации и независимой оценки качества

Начальник АНОК

 /И.М. Никулина /

Рабочая программа согласована с библиотекой МИЭТ

Директор библиотеки

 /Т.П. Филиппова /