



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФГБОУ ВО «ИГУ»

Кафедра общей и экспериментальной физики



Рабочая программа дисциплины (модуля)


Наименование дисциплины (модуля) Б1.О.04 Методы математического моделирования

Направление подготовки 11.04.04 Электроника и нанoeлектроника

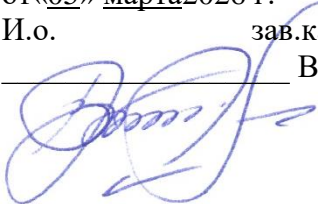
Направленность (профиль) подготовки Электроника и нанoeлектроника

Квалификация выпускника - магистр

Форма обучения очная

Согласовано с УМК
физического факультета
Протокол №53 от «17» марта 2026 г.
Председатель д.ф.-м.н., профессор
 Н.М. Буднев

Рекомендовано кафедрой:

Протокол № 7
от «05» марта 2026 г.
И.о. зав. кафедрой д.ф.-м.н.
 В.П. Дресвянский

Иркутск 2026 г.

Содержание

| | |
|---|-----------|
| I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ): | 3 |
| II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО | 3 |
| III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ | 3 |
| IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ | 5 |
| 4.1. Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов | 5 |
| 4.2. План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине | 6 |
| 4.3. Содержание учебного материала | 8 |
| 4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ | 9 |
| 4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение студентами в рамках самостоятельной работы (СРС) | 9 |
| 4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов | 10 |
| 4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов) | 10 |
| V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) | 10 |
| VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) 12 | |
| 6.1. Учебно-лабораторное оборудование: | 12 |
| 6.2. Программное обеспечение: | 12 |
| 6.3. Технические и электронные средства: | 12 |
| VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ | 12 |
| VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ | 13 |

I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ):

Курс «Методы математического моделирования» является не только прикладным направлением, позволяющим студентам освоить самостоятельные навыки моделирования структуры и свойств нанокomпонентов, но и необходимой составляющей формирования научного мировоззрения специалиста в области проектирования и модификации наноматериалов и наноструктур. Данный курс основан на углубленном изучении ключевых разделов квантовой теории строения вещества, знакомстве как с историей развития, так и с наиболее важными концепциями современной квантовой теории строения наноструктур, а также вычислительными методами и подходами в их моделировании.

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Методы математического моделирования» входит в модуль Б1.О.04 обязательной части Б1образовательной программы по направлению 11.04.04 «Электроника и наноэлектроника», профиль «Измерение и модификация свойств наноматериалов и наноструктур».

Для изучения данной учебной дисциплины (модуля) необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами: Молекулярная физика; Электричество и магнетизм; Колебания и волны. Оптика; Атомная физика; Математический анализ; Аналитическая геометрия; Линейная алгебра; Векторный и тензорный анализ; Дифференциальные уравнения; Интегральные уравнения и вариационное исчисление; Теория функции комплексного переменного; Квантовая механика.

III. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по данному направлению подготовки (специальности) 11.04.04 Электроника и наноэлектроника:

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

| Компетенция | Индикаторы компетенций | Результаты обучения |
|--|-------------------------------|--|
| ОПК-4: способен разрабатывать и применять специализированное программно- | ИД-1.ОПК-4 | Знать: методы расчета, проектирования, конструирования и модернизации электронной компонентной базы с использованием систем автоматизированного проектирования и |

| | | |
|--|------------|--|
| математическое обеспечения для проведения исследования и решения инженерных задач | ИД-2.ОПК-4 | компьютерных средств. Уметь: осуществлять выбор наиболее оптимальных прикладных программных пакетов для решения соответствующих задач научной и образовательной деятельности. |
| | ИД-3.ОПК-4 | Владеть: современными программными средствами моделирования, оптимального проектирования и конструирования приборов, схем и устройств электроники и нанoeлектроники различного функционального назначения. |

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет зачетные единицы, 108 часов,
в том числе 48 часов контактной работы.

Занятия проводятся только в очной форме обучения с применением дистанционного контроля самостоятельной работы студентов через ЭИОС факультета. Электронной и дистанционной форм обучения не предусматривается.

На практическую подготовку отводится 40 аудиторных часов (во время выполнения практических заданий).

Форма промежуточной аттестации: зачет.

4.1. Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

| № п/п | Раздел дисциплины/тема | Семестр | Всего часов | Из них практическая подготовка обучающихся | Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, практическую подготовку и трудоемкость (в часах) | | | Самостоятельная работа | Форма текущего контроля успеваемости/ Форма промежуточной аттестации (по семестрам) |
|----------|--|---------|-------------|--|---|--|--------------|------------------------|--|
| | | | | | Лекция | Семинар/ Практическое, лабораторное занятие | Консультация | | |
| | | | | | | | | | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
| 1 | Раздел 1. Классификация и история методов математического моделирования структуры и свойств наноматериалов. Описание современных неэмпирических и полумэмпирических методов, их особенностей и возможностей использования. | 2 | 20,1 | 8 | | 8 | | 12 | Экспресс-опрос |

| | | | | | | | | | |
|--------------------|--|---|------------|-----------|--|-----------|--|-----------|--|
| 2 | Раздел 2. Математический аппарат, входящий в основу методов расчета структуры и свойств наноматериалов. Его место в теории применяемых подходов. | 2 | 21,6 | 8 | | 8 | | 12 | Экспресс-опрос, решение задач |
| 3 | Раздел 3. Изучение основных программных комплексов компьютерного моделирования наноструктур. Структура входных и выходных файлов. Способы задания параметров молекулярных систем для расчета необходимых свойств наноструктур. | 2 | 21,6 | 8 | | 8 | | 12 | Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий |
| 4 | Раздел 4. Углубленное изучение методов расчета наноструктур от базовых и используемых в качестве нулевого приближения (SCF) до комплексных высокого уровня точности (DFT, ADC, CCSD). | 2 | 21,6 | 8 | | 8 | | 12 | Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий |
| 5 | Раздел 5. Использование изученных методов и программных комплексов для решения ряда практических задач моделирования наноструктур. | 2 | 21,6 | 8 | | 8 | | 12 | Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий |
| | зачет | 2 | 1,5 | | | | | | зачет |
| Итого часов | | | 108 | 40 | | 40 | | 60 | |

4.2. План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

| Семестр | Название раздела, темы | Самостоятельная работа обучающихся | | | Оценочное средство | Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы |
|---------|------------------------|------------------------------------|------------------|---------------------|--------------------|--|
| | | Вид самостоятельной работы | Сроки выполнения | Трудоемкость (час.) | | |
| | | | | | | |

| | | | | | | |
|---|--|---|--------------------|------|--|------------------------------|
| 2 | Раздел 1. Классификация и история методов математического моделирования структуры и свойств наноматериалов. Описание современных неэмпирических и полумэмпирических методов, их особенностей и возможностей использования. | Самостоятельное повторение и изучение дополнительной информации по теме раздела | В начале семестра | 11,5 | Экспресс-опрос | Вся рекомендуемая литература |
| 2 | Раздел 2. Математический аппарат, входящий в основу методов расчета структуры и свойств наноматериалов. Его место в теории применяемых подходов. | Самостоятельное решение задач | В течение семестра | 12 | Экспресс-опрос, решение задач | |
| 2 | Раздел 3. Изучение основных программных комплексов компьютерного моделирования наноструктур. Структура входных и выходных файлов. Способы задания параметров молекулярных систем для расчета необходимых свойств наноструктур. | Самостоятельное изучение дополнительной информации по теме раздела, составление образцов входных файлов | В течение семестра | 12 | Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий | |
| 2 | Раздел 4. Углубленное изучение методов расчета наноструктур от базовых и используемых в качестве нулевого приближения (SCF) до комплексных высокого уровня точности (DFT, ADC, CCSD). | Самостоятельное изучение дополнительной информации по теме раздела | В течение семестра | 12 | Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий | |
| 2 | Раздел 5. Использование изученных методов и программных комплексов для решения ряда практических задач моделирования наноструктур. | Самостоятельное составление рабочих примеров расчета различных свойств наноструктур | В течение семестра | 12 | Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий | |
| 2 | Все темы | Работа с методическими материалами. Подготовка к зчету | К концу семестра | 0,5 | Опрос | |
| Общий объем самостоятельной работы по дисциплине (час) | | | | 60 | | |

4.3. Содержание учебного материала

Раздел 1.

Классификация и история методов математического моделирования структуры и свойств наноматериалов. Модели качественного уровня, полуэмпирические методы, неэмпирические методы, комбинированные подходы.

Современные неэмпирические и полуэмпирические методы: SCF, DFT, ADC, CCSD, CI. Их особенности и возможности использования.

Раздел 2.

Математический аппарат, входящий в основу методов расчета структуры и свойств наноматериалов. Его место в теории применяемых подходов: применение понятий эрмитового сопряжения, диагонализации матричных операторов, ортонормированного базиса. Смысл собственных значений и собственных функций задачи на собственные значения в теории расчета свойств наноструктурных систем.

Раздел 3.

Изучение основных программных комплексов компьютерного моделирования наноструктур: Gaussian, Gamess, Q-Chem. Структура входных (входная геометрия, базисные наборы, ключевые слова) и выходных файлов. Способы задания параметров молекулярных систем для расчета необходимых свойств наноструктур: использование различных ключевых слов для решения ряда практических задач.

Раздел 4.

Углубленное изучение методов расчета наноструктур от базовых и используемых в качестве нулевого приближения (SCF) до комплексных высокого уровня точности (DFT, ADC, CCSD). Подробное изучение структуры методов, используемых в них приближений, особенностей расчета с их использованием.

Раздел 5.

Использование изученных методов и программных комплексов для решения ряда базовых практических задач моделирования наноструктур: расчет структуры наночастиц и молекулярных комплексов, потенциалов ионизации и сродства к электрону, дипольных моментов, ширины запрещенной зоны, спектров излучения и поглощения.

Освоение комплексного применения полученных навыков для глобального изучения свойств наноструктур.

4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

| № п/н | № раздела и темы | Наименование практических занятий | Трудоемкость (час.) | | Оценочные средства | Формируемые компетенции (индикаторы)* |
|-------|------------------|---|---------------------|---------------------|--|---------------------------------------|
| | | | всего часов | из них практ. подг. | | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 1 | Раздел 1 | Классификация и история методов | 20,1 | 8 | Экспресс-опрос | ОПК-4 |
| 2 | Раздел 2 | Математический аппарат квантовой теории строения вещества | 21,6 | 8 | Экспресс-опрос, решение задач | ОПК-4 |
| 3 | Раздел 3 | Основные программные комплексы компьютерного моделирования наноструктур | 21,6 | 8 | Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий | ОПК-4 |
| 4 | Раздел 4 | Углубленное изучение методов расчета наноструктур | 21,6 | 8 | Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий | ОПК-4 |
| 5 | Раздел 5 | Практическое использование методов | 21,6 | 8 | Экспресс-опрос выполнение контрольных заданий | ОПК-4 |

4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение студентами в рамках самостоятельной работы (СРС)

| № нед. | Тема | Вид самостоятельной работы | Задание | Формируемая компетенция | ИДК |
|--------|---|-------------------------------|--|-------------------------|--|
| 1 | Классификация и история методов | Экспресс-опрос | Из открытых источников найти другие аналогичные методы, распределив по изученной классификации с пояснениями | ОПК-4 | ИД-1.ОПК-4 ИД-2.ОПК-4 ИД-3.ОПК-4 |
| 2-5 | Математический аппарат квантовой теории строения вещества | Экспресс-опрос, решение задач | Решение комплекта домашних задач | ОПК-4 | ИД-1.ОПК-4 ИД-2.ОПК-4 ИД-3.ОПК-4 |

| | | | | | |
|-------|---|--|--|-------|--|
| 6-9 | Основные программные комплексы компьютерного моделирования наноструктур | Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий | Из открытых источников найти инструкцию к предлагаемому в задании программному комплексу | ОПК-4 | ИД-1.ОПК-4 ИД-2.ОПК-4 ИД-3.ОПК-4 |
| 10-14 | Углубленное изучение методов расчета наноструктур | Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий | Составить ряд структурных элементов входных файлов по заданию | ОПК-4 | ИД-1.ОПК-4 ИД-2.ОПК-4 ИД-3.ОПК-4 |
| 16-17 | Практическое использование методов | Экспресс-опрос, выполнение контрольных заданий | Составить ряд примеров входных файлов, применимых для решения практических задач | ОПК-4 | ИД-1.ОПК-4 ИД-2.ОПК-4 ИД-3.ОПК-4 |

4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа реализуется:

- 1) Непосредственно в процессе аудиторных занятий, при выполнении практических работ.
- 2) В контакте с преподавателем вне рамок расписания - на консультациях по учебным вопросам, в ходе творческих контактов, при ликвидации задолженностей, при выполнении индивидуальных заданий и т.д.
- 3) В библиотеке, дома, в общежитии, на кафедре при подготовке к аудиторным занятиям по темам, вынесенным на самостоятельное изучение, и при изучении научной и специальной учебной литературы.

Самостоятельная работа студентов может быть как в аудитории, так и вне ее. Внеаудиторная самостоятельная работа студентов также включает в себя подготовку к устным опросам по каждому из изучаемых разделов. Также самостоятельная работа подразумевает систематический подход к обучению, в соответствии с предложенным в разделе 4.1 графиком, что, в свою очередь, способствует получению зачета по данной дисциплине.

4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовые работы учебным планом не предусмотрены

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

а) основная литература

- 1) Барановский В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия: учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений / В.И. Барановский.– М.: Издательский центр "Академия",

2008.– 384 с.

2) Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Учебное пособие. / В.Г.Цирельсон.– М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 495 с.

3) В.И. Барановский, Квантовая механика и квантовая химия.– М.: Лань, 2019.– 426 с.

4) В.И. Барановский, Квантовая механика и квантовая химия.– М.: Академия, 2008.– 384 с.

б) дополнительная учебная литература:

5) А.Б. Трофимов, Введение в квантовую химию: учеб. пособие.- Иркутск: Изд-во ИГУ, 2013.– 192 с.

6) Гельфанд И.М. Лекции по линейной алгебре / И.М. Гельфанд.– М.: Наука, 1971.– 272 с.

7) Маррел Дж. Химическая связь / Дж. Маррел, С. Кеттл, Дж. Теддер.– М.: Мир, 1980.– 382 с.

8) Р.Пантел, Г.Путхоф. Основы квантовой электроники. – М. «Мир», 1972.

в) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", полезных для освоения дисциплины

9) НБ ИГУ <http://library.isu.ru/ru>

10) ЭЧЗ «Библиотех» <https://isu.bibliotech.ru/>

11) ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com/>

12) ЭБС «Рукопт» <http://rucont.ru>

13) ЭБС «Айбукс» <http://ibooks.ru>

VI.МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Практические занятия по данной дисциплине проводятся в учебной аудитории по расписанию. Лабораторное оборудование не предусмотрено.

На факультете имеется компьютеризированная аудитория, предназначенная для самостоятельной работы, с неограниченным доступом в Интернет, стандартными средствами просмотра презентаций и других материалов по курсу.

6.2. Программное обеспечение:

Стандартные сервисы сети Интернет, программные комплексы расчетов молекулярных систем с открытым доступом (Gauss), стандартные средства просмотра презентаций и других материалов по курсу, стандартные программы для построения графиков, таблиц и проведения расчётов.

6.3. Технические и электронные средства:

Для проведения практических занятий в качестве демонстрационного оборудования используются проектор, экран и меловая доска. Используются современные образовательные технологии: информационные (лекции и презентации в PowerPoint), проектные (мультимедиа, видео). Использование глобальной компьютерной сети позволяет обеспечить доступность Интернет-ресурсов и реализовать самостоятельную работу студентов, в ходе которой они могут вычитывать научные статьи по темам курса. На лекциях могут использоваться мультимедийные средства: проектор (CASIO XJ-A241), переносной экран (ClassicSolution, T195x195/1MW-LU/B), ноутбук Lenovo B590. На факультете имеется компьютеризированная аудитория, предназначенная для самостоятельной работы, с неограниченным доступом в Интернет.

VII.ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Классические практические занятия, экспресс-опросы.

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Фонд оценочных средств (ФОС) представлен в приложении.

Оценочные материалы для входного контроля:

Проводится опрос на первом занятии.

Оценочные материалы текущего контроля:

Содержание учебного материала разделено на дидактические единицы (ДЕ) – предметные темы, подлежащие обязательному изучению и усвоению в процессе обучения. Учитывается промежуточная аттестация по итогам самостоятельной работы, предусмотренной программой курса.

Оценочные материалы для промежуточной аттестации:

Примерный список вопросов к зачету:

- 1) Гамильтониан системы в общем виде и формулы для его компонентов многоэлектронной системы.
- 2) Вывод и решение уравнения Шредингера для простейшей системы.
- 3) Представление электронной системы по Шредингеру и Максуд Борну.
- 4) Матричное представление Гейзенберга в современных методах квантовой теории строения вещества.
- 5) Классификация методов расчета структуры и свойств молекулярных систем.
- 6) Примеры классических неэмпирических методов, используемых в современное время.
- 7) Эрмитово сопряжение. Ортонормированный базис. Оператор. Задача на собственные значения. Роль этих понятий в методах расчета наноструктур.
- 8) Структура входного и выходного файла стандартных программных комплексов, используемых для расчета нанообъектов.
- 9) Базисный набор, его представления. Поляризационные и диффузные функции.
- 10) Построение Z-матрицы.
- 11) Оптимизация структурных параметров.
- 12) Основные особенности методов Хартри-Фока (RHF, UHF, ROHF), MP2, DFT, CI, ADC, CCSD.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника.

Разработчик:



к.х.н. А.М. Артола

Программа рассмотрена на заседании кафедры общей и экспериментальной физики ИГУ
«05» марта 2026 г. Протокол № 7

И.о. зав. кафедрой  В.П. Дресвянский

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.