

Программа
краткосрочного повышения квалификации преподавателей и научных
работников высшей школы по направлению «Наноинженерия» на базе
учебного курса
«Многокомпонентное 3D проектирование наносистем»

Цель: профессиональная подготовка студентов в области применения средств и методов многокомпонентного 3d проектирования наносистем и нанообъектов в наноинженерии.

Категория слушателей: преподаватели, ведущие обучение по программе бакалавра/магистра по направлению «Наноинженерия»

Срок обучения: 36 часов (18 очная, 18 заочная)

Форма обучения: очно-заочная с дистанционным обучением заочной формы

Режим очных занятий: 6 часов в день – 3 дня с отрывом от работы

Задачами данного курса является изучение:

- методических аспектов преподавания курса в рамках реализации программ подготовки бакалавров/магистров по направлению «Наноинженерия»
- основных принципов многокомпонентного 3D проектирования наносистем;
- наноматериалов и наноструктур с новыми функциональными возможностями;
- молекулярной элементной базы;
- классификации наносистем (наноустройств);
- компьютерного проектирования 3D наносистем (наноустройств);
- нанодиагностики процессов синтеза наноматериалов и наносистем;
- САПР наносистем (наноустройств).

Требования к уровню освоения учебного курса

Обучаемые должны:

- Знать:
 - основные принципы многокомпонентного 3d проектирования наносистем;
 - номенклатуру, физические параметры нанообъектов и наносистем (наноустройств);
 - теоретические основы метода конечных разностей и его применение для анализа динамических процессов в наносистемах;
 - методы реализации на компьютере алгоритмов проектирования 3D наносистем;
 - методику диагностики поведения МКНН с помощью САПР;
 - перспективные направления развития наносистем.
- Уметь:
 - выбирать модели, адекватные поведению МКНН;
 - составлять конечноразностные схемы решения дифференциальных уравнений в частных производных, моделирующих поведение 3d наносистем;
 - выполнять КМ процессов контролируемой самосборки МКНН;
 - выполнять проектирование объектов молекулярной электроники (нанороботы, нанопамять, ММ и пр.) средствами современных САПР.
- Иметь навыки:

- составления моделей, адекватных поведению наносистем (наноустройств);
- построения конечноразностных схем решения простейших дифференциальных уравнений Шредингера;
- КМ процессов контролируемой самосборки МКНН;
- управления программными средствами современных САПР для проектирования объектов молекулярной электроники, таких как ММ и др.

Учебный курс «Многокомпонентное 3D проектирование наносистем» состоит из дистанционной и очной частей.

Дистанционная часть учебного образовательного курса обеспечивает слушателя необходимым объёмом знаний по выбранной тематике, включая подготовку слушателя к проведению лабораторного практикума. Задача дистанционной составляющей учебного курса – подготовить слушателя к очному посещению лаборатории в Московском Государственном Техническом Университете им. Н. Э. Баумана.

В дистанционной (теоретической) части учебного курса изложены основы многокомпонентного 3D проектирования наносистем. Теоретическая часть учебного курса состоит из шести лекций:

Лекция 1: Наносистемы (наноустройства)

Нанoeлектронные компоненты для сверхскоростных систем генерации, хранения, передачи и обработки информации. Нанохимические компоненты (сорбенты, катализаторы, насосы, реакторы) для высокоэффективной очистки, избирательного сверхскоростного высокопроизводительного синтеза, атомно-молекулярной инженерии. Нанoinструмент для процессов атомно-молекулярной инженерии. Модели нанoустройств (нанодвигатели, наноманипуляторы, молекулярные насосы, высокоплотная память, элементы механизмов нанороботов).

Лекция 2: Молекулярная элементная база

Проблемы перехода от 2D-интегральных схем к 3D-молекулярным структурам. Уравнение Шредингера. Основы молекулярной электроники. Нанoeлемент НЕ-ИЛИ Картера. Логические возможности молекулярных систем. Молекулярные запоминающие устройства. Молекулярная элементная база как система с распределенными параметрами. Многоуровневое функционирование.

Лекция 3: Основные принципы проектирования МКНН

Принципы: атомизма, наблюдаемости и познаваемости, периодичности элементов, активности атомов, физического и химического связывания, структурной организации, неадитивности свойств наносистем, дизайна, внутреннего совершенства, внешнего оправдания.

Лекция 4: Нанотехнологии и молекулярные компьютеры

Новая концепция нейрокомпьютинга, ее отличие от традиционной концепции фон Неймана. Принцип самоорганизации многокомпонентных 3D наносистем. Реакционно-диффузионные средства обработки информации. Проектирование реакционно-диффузионного процессора. Примеры вычислений. Биологические принципы обработки информации

Лекция 5: Методы диагностики МКНН

Метрика процессов синтеза наноматериалов и нанoкомпозиций. Экспресс-методы контроля геометрии, структуры, химического состава, электрофизических и оптических параметров, химических и биологических свойств объектов нано размеров. Диагностика поведения МКНН. Экспресс-методы регистрации электрических, магнитных и акустических полей нано

объектов, контроль их физических и химических свойств. Микро- и нанoinструмент для процессов атомно-молекулярной инженерии.

Лекция 6: Современные САПР проектирования МКНН

Графическая интерактивная система проектирования МКНН nanoXplorer, функциональные возможности и интерфейс системы. Панели инструментов, структура рабочего поля, режим drag-and-drop выполнения команд проектирования. Команды редактирования и масштабирования нанообъектов. Шаблоны. Использование готовых узлов. Методика создания моделей наносистем. Иерархическое проектирование наноструктур. Ввод в систему проектов на языке описания наноструктур nanoML. Менеджер иерархий системы. Примеры иерархического описания наноструктур на языке nanoML. Библиотека и база данных готовых наноструктур. Другие системы математического моделирования в нанотехнологиях (Chem 3D и пр.)

Очная (экспериментальная) часть учебного курса заключается в прохождении студентами лабораторного практикума. Все практические занятия проводятся в компьютерном классе с использованием специализированного компьютерного программного обеспечения и мультимедийных средств. В рамках практических занятий по курсу «Многокомпонентное 3D проектирование наносистем» студенты выполняют моделирование динамических процессов в наноструктурах и нанообъектах на примере решения уравнения Шредингера, реализуя для него конечно-разностную схему, и получая приближенную модель движения «частицы в прямоугольном потенциальном поле».

Основные задания на лабораторный практикум:

- Моделирование энергетического спектра в полупроводниковых наноструктурах «методом стрельбы»;
- Численное решение уравнения Пуассона;
- Исследование напряженного состояния ИНО в Ansys методом конечно-элементного анализа;
- Компьютерное моделирование динамического процесса теплопередачи в ИНО;
- Моделирование резонансного туннелирования в полупроводниковых наноструктурах;
- Моделирование колебаний двухатомной молекулы в среде MathLab;
- Компьютерное моделирование перколяционного кластера;
- Создание модели ИНО в системе Solid Works;
- Создание модели сборки в системе Solid Works;
- Исследование рекурсивного алгоритма построения фрактальных нанообъектов в среде MathLab–7

Методические рекомендации по реализации учебной программы

На дистанционную и очную части учебного курса отводится по 18 часов соответственно. Полное содержание лекций в электронной дистанционной части учебного курса находится на сайте nanolab.iu4.bmstu.ru. Для контроля степени освоения теоретической части учебного курса (лекций) используются **тестовые вопросы** для самопроверки и **контрольные вопросы**.

Тестовые вопросы к курсу

«Многокомпонентное 3D проектирование наносистем»

Лекция 1: «Наносистемы (наноустройства)»

В) 2D – нанообъект

Г) 3D – нанообъект

Ответ:

Лекция 3: «Основные принципы проектирования МКНН»

1. Чем обусловлена активность атомов?

А) Массой ядра атома

Б) Поляризуемостью

В) Эффективным зарядом и поляризуемостью

Г) Всем вышеперечисленным

Ответ:

2. Сколько p_z -орбиталей с внешнего уровня берётся от каждого атома, входящего в сопряжённую систему, в методе Хюккеля?

А) 1

Б) 2

В) 3

Г) 4

Ответ:

3. Какое условие всегда верно для величины β в методе Хюккеля?

А) $\beta < 1$

Б) $\beta > 1$

В) $\beta < 0$

Г) $\beta > 0$

Ответ:

4. Какой принцип является основополагающим принципом атомистического мировоззрения и современного естествознания?

А) Принцип наблюдаемости и познаваемости

Б) Принцип атомизма

В) Принцип периодичности элементов

Г) Принцип активности атомов

Ответ:

5. Какой принцип сформулирован А. Эйнштейном и связан с верой в красоту и совершенство законов природы?

А) Принцип наблюдаемости и познаваемости

Б) Принцип структурной организации

В) Принцип внутреннего совершенства

Г) Принцип неаддитивности свойств наносистем

Ответ:

Лекция 4: «Нанотехнологии и молекулярные компьютеры»

1. На чём основаны методы интегральных уравнений?

А) На применении аппарата интегральных уравнений Фредгольма – Шредингера

Б) На применении аппарата интегральных уравнений Хартри

В) На применении аппарата интегральных уравнений Шредингера

Г) На применении аппарата интегральных уравнений Фредгольма

Ответ:

2. В чём заключается одна из главных проблем при разработке технологии синтеза наноматериалов и, в частности, нанотрубок?

А) Отсутствие вычислительной техники, необходимой мощности

Б) Отсутствие технологий разработки

В) Отсутствие математического описания

Г) Отсутствие опыта разработки

Ответ:

3. Какой элемент в методе конечных элементов является наиболее простым в использовании?

- А) Одномерный симплекс–элемент
- В) Трёхмерный симплекс–элемент

- Б) Двумерный симплекс–элемент
- Г) Четырёхмерный симплекс–элемент

Ответ:

4. В чём заключается преимущество L – координат?

- А) При необходимости вычисления площади конечного элемента

- Б) При необходимости вычисления интегралов вдоль сторон конечного элемента

- В) При необходимости вычисления интегралов вдоль сторон конечного элемента и по его площади

- Г) При необходимости вычисления интегралов вдоль сторон конечного элемента и по его объёму

Ответ:

5. Что представляет собой задача изгиба опертой балки с точки зрения метода конечных элементов?

- А) Частный случай задачи о кручении бруса
- В) Частный случай задачи о кручении балки

- Б) Общий случай задачи о кручении бруса
- Г) Общий случай задачи о кручении балки

Ответ:

Лекция 5: «Методы диагностики МКЭ»

1. Какие алгоритмы эффективны для решения задач оптимизации с большим числом параметров?

- А) Алгоритм Немухина
- В) Минимального поиска

- Б) Атомные алгоритмы
- Г) Генетические алгоритмы

Ответ:

2. Каким методом успешно решаются задачи моделирования равновесных составов смесей при постоянном давлении, фазовых равновесий, адсорбции на поверхности твердых тел, свойств жидкостей в микропорах?

- А) Методом Монте-Карло
- В) Методом одной точки

- Б) Методом QWI
- Г) Методом классических траекторий

Ответ:

3. Что является наиболее важной отличительной особенностью наносистем?

- А) переход ферромагнитных материалов в суперпарамагнитное состояние

- Б) эффекта размерного квантования

- В) дифференциация параметров

- Г) образование квантовых точек

Ответ:

4. Какой программный пакет относится к системам расчета и оптимизации конструкций?

- А) Patran
- В) MSC Nastran

- Б) Dytran
- Г) Marc

Ответ:

5. Какой программный пакет предоставляет прямой доступ к результатам геометрического моделирования в наиболее популярных в мире программных пакетах автоматизированного проектирования или к универсальным форматам обмена данными при отсутствии прямых интерфейсов?

A) Patran
B) MSC Nastran
Ответ:

Б) Dytran
Г) Marc

Лекция 6: «Современные САПР проектирования МКНН»

1. На каких этапах жизненного цикла изделия могут создаваться 3D модели?

- A) Маркетинг
B) Технологическая подготовка производства
C) Проектирование
Г) На различных этапах

Ответ:

2. На каких этапах жизненного цикла изделия 3D модели могут использоваться для создания слайдов и анимационных фильмов, которые, в свою очередь, используются в качестве элементов или составных частей эксплуатационной документации?

- A) Производство
B) Эксплуатация
C) Ремонт и обслуживание
Г) Реализация и эксплуатация

Ответ:

3. В скольких режимах можно выполнить создание молекулярной структуры в рабочей области?

- A) 1
B) 2
C) 3
Г) 4

Ответ:

4. Какое действие необходимо сделать перед непосредственным выделением объектов в рабочей области в программе Hyperchem?

- A) Указать выделяемые объекты
B) Указать тип выделяемых объектов
C) Закрыть диалоговое окно Explicit Hydrogens
Г) Выполнить L-протяжку

Ответ:

5. Какие меню используются для проведения расчетов в программе Hyperchem?

- A) Setup
B) Explicit Hydrogens
C) Allow Arbitrary Valence
Г) Allow Arbitrary Molecular Mechanics

Ответ:

Контрольные вопросы для проверки материала в количестве 26 вопросов

1. Перечислите наноэлектронные компоненты сверхскоростных систем обработки информации?
2. Что можно изучать с помощью электронной микроскопии?
3. Какие вы знаете нано химические компоненты атомно-молекулярной инженерии?
4. Каковы особенности проявления самоорганизации в динамических системах.
5. Приведите примеры нанороботов.
6. Чем объясняется множественность полос на рентгенограмме?
7. В чем заключается принцип действия молекулярных насосов?
8. В чем заключается принцип структурной организации.
9. Какие вы знаете виды молекулярной памяти?
10. Опишите МЭБ как систему с распределенными параметрами.
11. В чем заключается принцип неадитивности свойств наносистем.
12. Понятие фрактала.

13. В чем заключается принцип наблюдаемости и познаваемости проектирования наносистем.
14. Получите интерполяционный полином для одномерного квадратичного симплекс-элемента.
15. В чем заключается принцип физического и химического связывания проектирования наносистем.
16. Дайте характеристику основных экспресс – методов диагностики наноустройств.
17. В чем заключается принцип активности атомов.
18. В чем заключается принцип атомизма.
19. В чем заключается принципы дизайна и внутреннего совершенства проектирования наносистем?
20. Изложите основные положения метода прямой жесткости.
21. Поясните работу молекулярного ЗУ на основе эффекта «выжигания провалов».
22. В чем заключается принцип обработки информации реакционно-диффузионными устройствами?
23. Изложите порядок работы с системой nanoXplorer.
24. Дайте сравнительную характеристику природных и «формальных» нейронных сетей.
25. Перечислите ограничения реакционно-диффузионного процессора, чем они вызваны?
26. В чем состоит биологический принцип обработки информации?

Темы контрольных рефератов по курсу
«Многокомпонентное 3D проектирование наносистем»

1. Молекулярные машины
2. Характеристика природных и «формальных» нейронных сетей
3. Алгоритмы формирования фрактала
4. Молекулярное ЗУ на основе эффекта «выжигания провалов»
5. Этапы построения конечноразностной схемы, моделирующей процесс диффузии

Учебно-тематический план

№	Название учебного курса и лекций	Всего, час.	в том числе (указать часы)			Форма контроля
			Семинары по тематике лекций (самостоятельное изучение, дистанционное общение преподавателем, вопросы-ответы через email, форум, чат и др.)	Самостоятельная работа. Изучение материалов лекционных курсов и подготовка ответов на контрольные вопросы	Очный практикум или другое практическое задание	
	«Многокомпонентное 3D проектирование наносистем»	36 ч.	15 ч.	6 ч.	15 ч.	Контрольные вопросы
1.	Лекция 1: Наносистемы (наноустройства)		2 ч.	1 ч.		
2.	Лекция 2: Молекулярная элементная база		3 ч.	1 ч.		
3.	Лекция 3: Основные принципы проектирования МКНН		3 ч.	1ч.		

4.	Лекция 4: Нанотехнологии и молекулярные компьютеры		3 ч.	1 ч.		
5.	Лекция 5: Методы диагностики МКНН		3 ч.	1 ч.		
6.	Лекция 6: Современные САПР проектирования МКНН		3 ч.	1 ч.		
Итоговый контроль				Контрольные вопросы		

**Список литературы
и др. дополнительных источников информации в кол-ве – 15.**

1. Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А. Основы наноэлектроники: Учеб. пособие. – 2-е изд., испр. и доп. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004. – 496 с. – (Серия «Учебники НГТУ»).
2. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.А., Вычислительные методы для инженеров. – М.: Высшая школа, 1994.
3. Лозовский В., Константинова Г., Лозовский С. Нанотехнология в электронике. Введение в специальность/Серия: **Учебники для вузов**. М.: Изд-во Лань, 2008. – 336 с. – (Нанотехнология).
4. Поршнев С.В. Вычислительная математика. **Курс лекций**. Учебное пособие. – СПб.: БХВ–Петербург, 2004.–320 с.: ил.
5. Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию/ Н. Кобаяси: пер. с японск.– 2-е изд. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008.–134 с.: ил. – (Нанотехнология).
6. Л. Сегерлинд. Применение метода конечных элементов. М:Мир, 1979, 350 с
7. Рамбиди Н. Г. Нанотехнологии и молекулярные компьютеры. М.: Изд-во: ФИЗМАТЛИТ, 2007 . – 256 с. (Нанотехнология).
8. Балабанов В. Нанотехнологии. Наука будущего. М.: Эксмо, 2009 . – 256 с.
9. Нанотехнологии. Наноматериалы. Наносистемная техника. М: Техносфера, 2008. – 438 с. ISBN 978-5-94836-180-2 (Серия: Мир электроники).
10. Неволин В. Зондовые нанотехнологии в электронике. М: Техносфера, 2008. –160 с. (Серия: Мир электроники).
11. Суздальев И. П. Нанотехнология. Физикохимия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: Либроком, 2009 . – 592 с. (Серия: Синергетика: от прошлого к будущему).
12. Дьячков П. Н. Углеродные нанотрубки. Строение, свойства, применения (+ CD-ROM). М.: Бином, 2006 г.– 296 стр.
13. Кац Е. А. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры. Родословная форм и идей. М.: ЛКИ, 2008, – 296 с.
14. Поляков С.В.. Численные методы для моделирования электронных процессов в квантовых структурах. Вестник ННГУ, Серия "Математическое моделирование и оптимальное управление", 2005, вып. 1(28), с. 200-207.
15. К. Бреббия, У. Стефан. Применение метода граничных элементов в технике.

**Полное содержание лекций в электронной дистанционной части
учебного курса на сайте nanolab.iu4.bmstu.ru**