

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
(ВлГУ)



А.А.Панфилов
« 02 » 09 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ
(наименование дисциплины)

Направление подготовки **01.04.02 Прикладная математика и информатика**

Профиль/программа подготовки «**Математическое моделирование**»

Уровень высшего образования **магистратура**

Форма обучения **очная**

Семестр	Трудоемкость зач. ед./ час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРС, час.	Форма промежуточной аттестации (экзамен/зачет/зачет с оценкой)
3	3/108	18		18	72	зачет с оценкой
Итого	3/108	18		18	72	зачет с оценкой

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Математическое моделирование в нанотехнологиях» является освоение приёмов и методов математического моделирования для описания свойств нано объектов и процессов нанотехнологий.

Задачи:

1. Получение представления об основных актуальных направлениях развития математического моделирования в прикладных задачах в сфере нанотехнологий.
2. Мотивация студентов к выбору собственного направления исследований при выполнении научной работы и подготовке выпускной квалификационной работы.
3. Развитие навыков представления результатов своей работы и участия в научной дискуссии.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Математическое моделирование в нанотехнологиях» относится к базовой части блока Б.1 основной образовательной программы. Изучение дисциплины проходит в третьем семестре и должна помочь магистранту ознакомиться с современными методами математического моделирования, которые будут использоваться магистрантом при работе над магистерской диссертацией.

Для изучения дисциплины студенты должны обладать знаниями, умениями и навыками по разработке математических моделей и их программных реализаций, понимать базовые принципы моделирования, владеть современными языками программирования и современными математическими пакетами, обладать знаниями в области математического анализа, такими как дифференциальное, интегральное, матричное исчисления, теория вероятностей и математическая статистика, дискретная математика, вычислительная математика. Пререквизиты дисциплины: Современные проблемы прикладной математики и информатики; Непрерывные математические модели; Математическое моделирование нелинейных волновых процессов.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП

Код формируемых компетенций	Уровень освоения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине характеризующие этапы формирования компетенций (показатели освоения компетенции)
1	2	3
ОПК-2 основные классические, современные и перспективные подходы и методы решения задач фундаментальной и прикладной математики и информатики;	частичное освоение	<i>Знания:</i> основные классические, современные и перспективные подходы и методы решения задач фундаментальной и прикладной математики и информатики; <i>Умения:</i> уметь адаптировать общие математические методы решения к специфике прикладных задач; предлагать и реализовывать новые методы решения прикладных задач; <i>Навыки:</i> получить навыки оценки и сравнительного анализа альтернативных методов решения прикладных задач;
ОПК-3 Способен разрабатывать математические модели и проводить их анализ при решении задач в области профессиональной деятельности	частичное освоение	<i>Знания:</i> получить знания основных концепции и особенностей математического моделирования в области нанотехнологий; <i>Умения:</i> уметь разрабатывать математические модели для решения задач в области nano физики деятельности и оценивать их качество; при необходимости реализовывать модель в виде компьютерной программы; <i>Навыки:</i> получить навыки научного исследования задач предметной области с использованием разработанных моделей;

4. ОБЪЕМ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 час

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Объем учебной работы, с применением интерактивных методов (в часах / %)	Формы текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	СРС		
1	Введение в нанотехнологии. Основные понятия, явления и эффекты.	3	1-2	2	-	2	14	1/25	
2	Потенциалы взаимодействия. Методы моделирования частица-частица	3	3-10	8	-	8	31	8/50	Рейтинг – контроль № 1
3	Моделирование из первых принципов. Квантово-механические методы моделирования	3	11-18	8	-	8	27	8/50	Рейтинг – контроль № 2 Рейтинг – контроль № 3
Наличие в дисциплине КП/КР		-	-	-	-	-	-	-	-
Итого по дисциплине		3	18	18	-	18	72	17/47	Зачёт с оценкой

Содержание лекционных занятий по дисциплине

Раздел 1. Введение в нанотехнологии. Основные понятия, явления и эффекты.

Тема 1. Моделирование в nano размерной области. Особенности моделирования (2 часа).

Содержание темы. Характеристика nano размерных объектов и их особенности. Размерные эффекты и учет их влияния на физические явления.

Раздел 2 Потенциалы взаимодействия. Методы моделирования частица-частица (8 часов)

Тема 1 Метод потенциалов. (2 часа).

Содержание темы. Потенциалы парного взаимодействия. Ближнедействующие потенциалы. Дальнедействующие потенциалы.

Потенциалы учитывающие структурные особенности материалов. Методы частиц.

Тема 2. Модели среды. (2 часа).

Сеточные и гибридные модели среды (частицы и частицы + сетка). Модели с разномасштабными явлениями.

Тема 3. Динамические задачи моделирования наноструктур. (2 часа).

Содержание темы. Стационарные и динамические задачи моделирования. Процессы роста и формирования наноструктур в равновесном и неравновесном состояниях

Тема 4. Гидродинамические методы моделирования движения частиц.

Содержание темы. Гидродинамические методы моделирования роста наночастиц с фрактальными свойствами. Моделирование процессов самоорганизации при фазовых переходах.

Раздел 3 Моделирование из первых принципов. Квантово-механические методы моделирования (8 часов).

Тема 1 Методы Монте-Карло. (2 часа)

Содержание темы. Квантовый метод Монте-Карло. Объемные методы Монте-Карло.

Тема 2. Метод потенциалов. (2 часа).

Содержание темы. Метод Хартри-Фока. Метод сильной связи. Полуэмпирические методы и их реализация при моделировании.

Тема 3. Моделирование из первых принципов (2 часа).

Содержание темы. Моделирование структуры и свойств nano материалов из первых принципов. Моделирование роста и структур кластеров из первых принципов.

Тема 4. Теория функционала плотности (2 часа).

Содержание темы. Модель Изинга и моделирование динамики электрофизических, термодинамических, магнитных и оптических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.

Содержание лабораторных занятий по дисциплине

Раздел 1. Введение в нанотехнологии. Основные понятия, явления и эффекты.

1. Тема 1 Моделирования роста кластера из потока атомов с использованием модели частиц (диаметры 1-100нм);

Содержание лабораторных занятий. Моделирования роста кластера из потока атомов с использованием модели частиц (диаметры 1-100нм);

Раздел 2 Потенциалы взаимодействия. Методы моделирования частица-частица (8 часов)

Тема 1 Моделирование роста кластера (4 часа).

Содержание лабораторных занятий. Моделирование роста кластера с использованием одного из потенциалов взаимодействия: потенциал Ленарда-Джонса; потенциал Бермингемма; потенциал Терсоффа; Потенциал Морзе.

Тема 2 Моделирование структуры наночастиц (4 часа)

Содержание практических лабораторных занятий. Моделирование структуры наночастиц диаметрами (1-100нм) из первых принципов из: углерода; золота; кремния.

Раздел 3 Моделирование из первых принципов. Квантово-механические методы моделирования (8 часов).

Тема 1. Моделирование зависимости термодинамических характеристик наноструктур.(4 часа)

Содержание лабораторных занятий. Расчет изменения из первых принципов: теплоемкости тонких пленок нано частиц в зависимости от диаметра и структуры связей.

Тема 2 Моделирование методом Монте-Карло (4 часа).

Моделирование процесса осаждения тонкой пленки с использованием метода Монте-Карло или с использованием метода частица-кластер.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В преподавании дисциплины «Математическое моделирование в нанотехнологиях» используются разнообразные образовательные технологии как традиционные, так и с применением активных и интерактивных методов обучения.

Активные и интерактивные методы обучения: В преподавании дисциплины «Математическое моделирование в нанотехнологиях» используются разнообразные образовательные технологии как традиционные, так и с применением активных и интерактивных методов обучения.

Активные и интерактивные методы обучения:

Групповая дискуссия (лекционные занятия по разделам 2 и 3);

Разбор конкретных ситуаций (лекционные занятия);

Уровневая дифференциация (контрольные мероприятия, защита лабораторных работ).

6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ.

а) вопросы рейтинг-контроля:

Рейтинг-контроль 1:

1. Методы классификации наноматериалов.
2. Размерные эффекты в наноматериалах.
3. Изменение электрофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
4. Изменение теплофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.

5. Изменение магнитных свойств материалов при переходе к наноразмерным масштабам.

6. Изменение структуры материалов при переходе к наноразмерным масштабам.

Рейтинг-контроль 2:

1. Потенциалы парного взаимодействия
2. Ближнедействующие потенциалы
3. Дальнедействующие потенциалы
4. Потенциалы учитывающие структурные особенности материалов
5. Принципы и алгоритмы стеганографии.
6. Методы частиц
7. Сеточные модели
8. Гибридные модели (частицы+сетка)
9. Модели с разномасштабными явлениями
10. Стационарные и динамические задачи моделирования
11. Гидродинамические метода моделирования движения частиц

Рейтинг-контроль 3:

1. Квантовый метод Монте-Карло
2. Объемные методы Монте-Карло
3. Метод Хартри-Фока
4. Метод сильной связи
5. Полуэмпирические методы
6. Моделирование структуры материалов из первых принципов:
7. Моделирование структур кластеров из первых принципов
8. Теория функционала плотности

б) вопросы к зачёту с оценкой:

1. Методы классификации наноматериалов.

2. Размерные эффекты в наноматериалах.

3. Изменение электрофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.

4. Изменение теплофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.

5. Изменение магнитных свойств материалов при переходе к наноразмерным масштабам.

6. Изменение структуры материалов при переходе к наноразмерным масштабам.

7. Потенциалы парного взаимодействия

8. Ближнедействующие потенциалы

9. Дальнедействующие потенциалы

10. Потенциалы учитывающие структурные особенности материалов

11. Принципы и алгоритмы стеганографии.

12. Методы частиц

13. Сеточные модели

14. Гибридные модели (частицы+сетка)

15. Модели с разномасштабными явлениями

16. Стационарные и динамические задачи моделирования

17. Гидродинамические метода моделирования движения частиц

18. Квантовый метод Монте-Карло

19. Объемные методы Монте-Карло

20. Метод Хартри-Фока

21. Метод сильной связи

22. Полуэмпирические методы

23. Моделирование структуры материалов из первых принципов:

24. Моделирование структур кластеров из первых принципов

25. Теория функционала плотности.

в) вопросы к самостоятельной работе студента:

1. Методы классификации наноматериалов.

2. Размерные эффекты в наноматериалах.
3. Изменение электрофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
4. Изменение теплофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
5. Изменение магнитных свойств материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
6. Изменение структуры материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
7. Потенциалы парного взаимодействия
8. Ближнедействующие потенциалы
9. Дальнедействующие потенциалы
10. Потенциалы учитывающие структурные особенности материалов
11. Принципы и алгоритмы стеганографии.
12. Методы частиц
13. Сеточные модели
14. Гибридные модели (частицы+сетка)
15. Модели с разномасштабными явлениями
16. Стационарные и динамические задачи моделирования
17. Гидродинамические метода моделирования движения частиц
18. Квантовый метод Монте-Карло
19. Объемные методы Монте-Карло
20. Метод Хартри-Фока
21. Метод сильной связи
22. Полуэмпирические методы
23. Моделирование структуры материалов из первых принципов:
24. Моделирование структур кластеров из первых принципов
25. Теория функционала плотности

Фонд оценочных средств для проведения аттестации уровня сформированности компетенций обучающихся по дисциплине оформляется отдельным документом.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ	
		Количество экземпляров изданий в библиотеке ВлГУ в соответствии с ФГОС ВО	Наличие в электронной библиотеке ВлГУ
1	2	3	4
Основная литература*			
1. Юрчук С.Ю. Методы математического моделирования [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Юрчук С.Ю.— Электрон. текстовые данные.— Москва: Издательский Дом МИСиС, 2018.— 96 с.	2018		http://www.iprbookshop.ru/78562.html .— ЭБС «IPRbooks»
2. Афонин В.В., Моделирование систем / Афонин В.В., Федосин С.А. - М.: Национальный Открытый Университет "ИНТУИТ", 2016. (Основы информационных технологий) - ISBN 978-5-9963-0352-6	2016.		http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996303526.html
3. Фёдоров А.В., Моделирование физических и химических превращений в микро- и наночастицах металлов / Фёдоров А.В. - Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2017. - 268 с. - ISBN 978-5-7782-3290-7	2017		http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785778232907.html
Дополнительная литература			
1. Звонарев С.В. Моделирование структуры и свойств наносистем [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие/ Звонарев С.В., Кортвов В.С.,	2014		http://www.iprbookshop.ru/68259.html .— ЭБС «IPRbooks»

Штанг Т.В.— Электрон. текстовые данные.— Екатеринбург: Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, 2014.— 120 с.			
2. Звонарев, С.В. Моделирование структуры и свойств наносистем : учебно-методическое пособие / С.В. Звонарев, В.С. Кортов, Т.В. Штанг ; научный редактор Б.В. Шульгин. — Екатеринбург : УрФУ, 2014. — 120 с. — ISBN 978-5-7996-1203-0.	2014		https://e.lanbook.com/book/98317
3. Матюшкин И.В., Моделирование и визуализация средствами MATLAB физики наноструктур / Матюшкин И.В. - М. : Техносфера, 2011. - 20 с. - ISBN 978-5-94836-286-1	2011		http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785948362861.html
4. Практикум по выполнению лабораторных работ по дисциплине "Математическое моделирование в нанотехнологиях" [Электронный ресурс] / А. О. Кучерик, Д. Н. Бухаров ; Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых (ВлГУ) .— Электронные текстовые данные (1 файл: 240 Кб) .— Владимир : Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых (ВлГУ), 2013 .— 49 с. : ил., табл. — Заглавие с титула экрана .— Библиогр.: с. 48-49 .	2013		http://e.lib.vlsu.ru/bitstream/123456789/2868/1/00384.docx .

7.2. Периодические издания

1. Журнал «Российские нанотехнологии». Режим доступа: http://www.nanorf.ru/science.aspx?cat_id=4353
2. Журнал «Успехи физических наук». Архив номеров. Режим доступа: <http://www.ufn.ru/>
3. Журнал «Экспериментальной и технической физики». Архив номеров. Режим доступа: <http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/r/index>
4. Научная электронная библиотека. Режим доступа elibrary.ru

7.3. Интернет-ресурсы

1. <http://www.exponenta.ru>.
2. <http://math.semestr.ru/group/sampling-method.php>.
3. www.mathhelpplanet.com - некоммерческий математический форум, на котором можно получить консультацию и реальную помощь в решении по практически любому вопросу, связанному с математикой и многочисленными её приложениями.
4. <http://www.kxlab.com> - сайт _kx Лаборатории. Отправная точка поиска информации о новейших научных разработках в области вычислительной математики, автоматизации моделирования и программных продуктах _kx Лаборатории.
5. www.csin.ru - Образовательный интернет-проект, посвященный computer science и смежным дисциплинам. Мы формируем комьюнити людей, профессионально занимающихся или даже просто интересующихся данной тематикой. Также мы собираем информацию, например, русскоязычные курсы по информатике.
6. www.teorver.ru - Портал, посвященный таким разделам математики, как теория вероятностей, математическая статистика, теория массового обслуживания, математическая теория телетрафика и другим приложениям теории вероятностей.

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для реализации данной дисциплины имеются специальные помещения для проведения занятий лекционного типа, занятий практического типа, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы.

Практические занятия проводятся в аудитории (компьютерном классе) 511б-3 (или аналогичном компьютерном классе в зависимости от сетки расписания). Минимально возможный объём ОЗУ для выполнения лабораторных работ – 4 Гб.

Перечень используемого лицензионного программного обеспечения:

- 1) MS Word;
- 2) MS PowerPoint;
- 3) MS Excel;
- 4) Matlab.
- 5) Язык программирования Microsoft C++.

Рабочую программу составил Бутковский О.Я.

(ФИО, подпись)

Рецензент

(представитель работодателя) Ген. директор ООО «ФС Сервис» Квасов Д.С.

(место работы, должность, ФИО, подпись)

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ФиПМ
Протокол № 1 от 02.09.2019 года

Заведующий кафедрой

С.М. Аракелян

(подпись)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии
направления «Математическое моделирование в нанотехнологиях»
Протокол № 1 от 02.09.2019 года

Председатель комиссии

С.М. Аракелян

(подпись)

ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____