

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)

Институт прикладной математики, физики и информатики
 (Наименование института)

УТВЕРЖДАЮ:
 Директор института
 _____ К.С. Хорьков
 _____ 08 _____ 2021 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ
 (наименование дисциплины)

направление подготовки / специальность

01.04.02 Прикладная математика и информатика
 (код и наименование направления подготовки (специальности))

направленность (профиль) подготовки

Математическое моделирование
 (направленность (профиль) подготовки)

г. Владимир
 2021

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Математическое моделирование в нанотехнологиях» является формирование представлений о базовых принципах моделирования процессов в наносистемах и их характеристик.

Задачи:

- изучение способов модельного представления и визуализации наноструктур и систем на их основе, процессов их формирования;
- получение представлений о современных методах и средствах математического моделирования наноматериалов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

Дисциплина «Математическое моделирование в нанотехнологиях» относится к обязательной части учебного плана.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине, в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	
ОПК-2. Способен совершенствовать и реализовывать новые математические методы решения прикладных задач	ОПК-2.1. Знает основные классические, современные и перспективные подходы и методы решения задач фундаментальной и прикладной математики и информатики. ОПК-2.1. Умеет адаптировать общие, а также предлагать и реализовывать новые математические методы решения прикладных задач. ОПК-2.3. Владеет навыками оценки и сравнительного анализа альтернативных методов решения прикладных задач.	Знает основные классические, современные и перспективные подходы и методы решения задач, применяемые для математического моделирования в нанотехнологиях. Умеет: • адаптировать общие математические методы для решения прикладных задач в области нанотехнологий; • предлагать и реализовывать новые математические методы для решения прикладных задач в области нанотехнологий. Владеет навыками оценки и сравнительного анализа альтернативных методов решения прикладных задач.	Отчеты по лабораторным работам Контрольные вопросы к лабораторным работам Контрольные вопросы к рейтинг-контролю и промежуточной аттестации
ОПК-3. Способен разрабатывать математические модели и проводить их анализ при решении задач в области профессиональной деятельности	ОПК-3.1. Знает основные концепции и особенности математического моделирования в различных областях знаний. ОПК-3.2. Умеет разрабатывать математические модели для решения задач в области профессиональной деятельности, оценивать их качество и при необходимости реализовывать модель в виде компьютерной программы. ОПК-3.3. Владеет навыками научного исследования задач предметной области с использованием разработанных моделей.	Знает основные концепции и особенности математического моделирования в области нанотехнологий. Умеет разрабатывать математические модели для решения задач в области нанотехнологий, оценивать их качество и при необходимости реализовывать модель в виде компьютерной программы. Владеет навыками научного исследования задач в области нанотехнологий с использованием разработанных моделей.	Отчеты по лабораторным работам Контрольные вопросы к лабораторным работам Контрольные вопросы к рейтинг-контролю и промежуточной аттестации

4. ОБЪЕМ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов

Тематический план форма обучения – очная

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа обучающихся с педагогическим работником				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	в форме практической подготовки		
1	Квантово-теоретическое моделирование в нанотехнологиях.	3	1-7	8	-	8	12	24	Рейтинг-контроль № 1
2	Моделирование молекулярных систем.	3	8-11	4	-	4	12	24	Рейтинг-контроль № 2
3	Моделирование методами молекулярной механики, молекулярной динамики и Монте-Карло.	3	12-18	6	-	6	12	24	Рейтинг-контроль № 3
Всего за 3 семестр:		-	-	18	-	18	-	72	Зачет с оценкой
Наличие в дисциплине КПП/КР		-	-	-	-	-	-	-	-
Итого по дисциплине		-	-	18	-	18	-	72	Зачет с оценкой

Содержание лекционных занятий по дисциплине

Раздел 1. Квантово-теоретическое моделирование в нанотехнологиях.

1. Вычислительный эксперимент как основа математического моделирования в нанотехнологиях.
2. Квантово-теоретические расчеты: основные понятия и математический аппарат квантовой механики.
3. Решение частной задачи квантово-теоретическим методом: модель одноэлектронного атома.
4. Моделирование многоэлектронного атома. Метод Хартри-Фока.
5. Теория функционала плотности.

Раздел 2. Моделирование молекулярных систем.

1. Моделирование молекулярных систем: основные положения.
2. Моделирование молекулярных систем методом валентных схем.
3. Моделирование молекулярных систем методом молекулярных орбиталей.

Раздел 3. Моделирование методами молекулярной механики, молекулярной динамики и Монте-Карло.

1. Моделирование методом молекулярной механики.
2. Моделирование методом молекулярной динамики.
3. Моделирование методом Монте-Карло.

Содержание лабораторных занятий по дисциплине

- Тема 1. Квантовая модель одноэлектронного атома (4 часа).
 Тема 2. Многоэлектронные атомы (4 часа).
 Тема 3. Потенциалы взаимодействия частиц (4 часа).
 Тема 4. Моделирование систем методом молекулярной динамики (4 часа).
 Тема 5. Моделирование процесса формирования нанокластеров (2 часа).

5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

5.1. Текущий контроль успеваемости

Примерный список вопросов к рейтинг-контролю №1

1. Обоснование необходимости использования математического моделирования нанообъектов и наносистем наряду с их физическим моделированием.
2. Основные типы моделей.
3. Этапы вычислительного эксперимента.
4. Основные численные методы для моделирования наносистем.
5. Основной принцип квантово-теоретических расчетов. Необходимость и наиболее распространенные виды приближений.
6. Цель и основные подходы молекулярной динамики.
7. Цель и основные подходы молекулярной механики.
8. Основной принцип методов Монте-Карло.
9. Особенность многомасштабного моделирования материалов и процессов.
10. Характеристики системы, которые должны быть известны, чтобы ее состояние считалось определенным в классической механике и в квантовой механике.
11. Волновая функция.
12. Какие закономерности энергетических состояний электрона в атоме водорода определяются априорными знаниями?
13. Уравнение Шредингера для электрона в атоме водорода в декартовых и сферических координатах и его решение.
14. Основные составляющие, необходимые для описания движения частицы.
15. Полная энергия частицы. Уравнение Шредингера. Уравнение Шредингера для стационарных состояний
16. Причина невозможности точного аналитического решения уравнения Шредингера для двухэлектронного атома. Гамильтониан для многоэлектронного атома.
17. Метод Хантри для многоэлектронного атома.
18. Использование приближенных функций Слэтера-Зенера в методе Хантри-Фока.
19. Интерпретация результатов квантово-теоретического моделирования состояния электрона в атоме водорода. Квантовые числа.

Примерный список вопросов к рейтинг-контролю №2

1. Предпосылки разработки метода функционала плотности.
2. Модель Томаса-Ферми.
3. Теоремы Хозенберга-Кона.
4. Самосогласованные уравнения Кона-Шема для системы невзаимодействующих электронов.
5. Самосогласованные уравнения Кона-Шема для системы взаимодействующих электронов.
6. Физико-химические закономерности строения молекулярных систем.
7. Химическая связь в молекулах.
8. Молекулярные системы: приближение Борна-Оппенгеймера.
9. Моделирование молекулярных систем: метод валентных схем.
10. Моделирование молекулярных систем: метод молекулярных орбиталей.

Примерный список вопросов к рейтинг-контролю №3

1. Моделирование методом молекулярной механики: основные положения.
2. Потенциальная энергия деформированной молекулы.
3. Моделирование методом молекулярной механики: валентное силовое поле.
4. Определение теплоты образования методом молекулярной механики.
5. Основной принцип и основная задача моделирования методом молекулярной динамики, движение молекулы, его связь с энергией системы.

6. Моделирование методом молекулярной динамики: способ решения системы уравнений движения.
7. Применение МД-моделирования.
8. Граничные условия при МД-моделировании.
9. Обеспечение температурных условий при МД-моделировании.
10. Сравнение метода Монте-Карло с методом молекулярной динамики.
11. Метод Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса.
12. Эффективная генерация случайных чисел для метода Монте-Карло.
13. Применение метода Монте-Карло для задач статистической механики равновесных систем.
14. Применение метода Монте-Карло для задач статистической механики неравновесных систем.

5.2. Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины

Экзаменационные вопросы

1. Этапы вычислительного эксперимента и основные типы моделей.
2. Основные численные методы для моделирования наносистем.
3. Особенность многомасштабного моделирования материалов и процессов.
4. Основные составляющие, необходимые для описания движения частицы.
5. Характеристики системы, которые должны быть известны, чтобы ее состояние считалось определенным в классической механике и в квантовой механике.
6. Волновая функция. Полная энергия частицы. Уравнение Шредингера. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.
7. Уравнение Шредингера для электрона в атоме водорода в декартовых и сферических координатах и его решение.
8. Интерпретация результатов квантово-теоретические моделирования состояния электрона в атоме водорода. Квантовые числа.
9. Причина невозможности точного аналитического решения уравнения Шредингера для двухэлектронного атома. Гамильтониан для многоэлектронного атома.
10. Метод Хантри для многоэлектронного атома.
11. Метод Хантри-Фока для многоэлектронного атома.
12. Использование приближенных функций Слэтера-Зенера в методе Хантри-Фока.
13. Предпосылки разработки метода функционала плотности.
14. Модель Томаса-Ферми.
15. Теоремы Хоэнберга-Кона.
16. Самосогласованные уравнения Кона-Шема для системы невзаимодействующих электронов.
17. Самосогласованные уравнения Кона-Шема для системы взаимодействующих электронов.
18. Физико-химические закономерности строения молекулярных систем.
19. Химическая связь в молекулах.
20. Молекулярные системы: приближение Борна-Оппенгеймера.
21. Моделирование молекулярных систем: метод валентных схем.
22. Моделирование молекулярных систем: метод молекулярных орбиталей.
23. Моделирование методом молекулярной механики: основные положения.
24. Моделирование методом молекулярной механики: потенциальная энергия деформированной молекулы.
25. Моделирование методом молекулярной механики: валентное силовое поле.
26. Моделирование методом молекулярной механики: теплота образования.
27. Основной принцип и основная задача моделирования методом молекулярной динамики, движение молекулы, его связь с энергией системы.

28. Моделирование методом молекулярной динамики: способ решения системы уравнений движения.
29. Применение моделирования методом молекулярной динамики.
30. Граничные условия при моделировании методом молекулярной динамики.
31. Обеспечение температурных условий при моделировании методом молекулярной динамики.
32. Сравнение метода Монте-Карло с методом молекулярной динамики.
33. Метод Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса.
34. Эффективная генерация случайных чисел для метода Монте-Карло.
35. Применение метода Монте-Карло для задач статистической механики равновесных систем.
36. Применение метода Монте-Карло для задач статистической механики неравновесных систем.

5.3. Самостоятельная работа обучающегося.

Самостоятельная работа обучающихся по дисциплине «Математическое моделирование в нанотехнологиях» включает в себя следующие виды деятельности:

- 1) проработку учебного материала по конспектам лекций, учебной и научной литературе;
- 2) подготовку к лабораторным занятиям;
- 3) подготовку по всем видам контрольных мероприятий, в том числе к текущему контролю знаний и промежуточной аттестации.

Фонд оценочных материалов (ФОМ) для проведения аттестации уровня сформированности компетенций обучающихся по дисциплине оформляется отдельным документом.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ
		Наличие в электронном каталоге ЭБС
Основная литература		
1. Аракелян С.М., Кучерик А.О., Прокошев В.Г., Рау В.Г., Сергеев А.Г. Введение в фемтонанопотонику: фундаментальные основы и лазерные методы управляемого получения и диагностики наноструктурированных материалов: учебное пособие. М.: Логос.	2017	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785987048122.html
2. Держинский Р.И. Уравнения математической физики: курс лекций. М.: Московская государственная академия водного транспорта.	2015	http://www.iprbookshop.ru/46875.html
Дополнительная литература		
1. Аверченков В.И., Федоров В.П., Хейфец М.Л. Основы математического моделирования технических систем. М.: ФЛИНТА.	2016	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785976512788.html
2. Гриняев Ю.В. и др. Методы математической физики: учебное пособие. Томск: Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Эль Контент.	2012	http://www.iprbookshop.ru/13862.html

6.2. Периодические издания

1. Российские нанотехнологии (научно-технический журнал).
<https://sciencejournals.ru/journal/nano/>
2. Наносистемы: физика, химия, математика (научно-технический журнал).
<http://nanojournal.ifmo.ru>

3. Наноиндустрия (научно-технический журнал).
<https://www.nanoindustry.su/>

6.3. Интернет-ресурсы

1. Кристаллографическая и кристаллохимическая база данных для минералов и их структурных аналогов «МИНКРИСТ» // Режим доступа:
<http://database.iem.ac.ru/mincryst/rus/>

2. Кембриджский банк структурных данных // Режим доступа:
http://webcsd.ccdc.cam.ac.uk/client_log_in.php?first_attempt=1

3. Ведение в теорию функционала плотности // Режим доступа:
<http://kodomo.fbb.msu.ru/~golovin/pdf/15.pdf>

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для реализации данной дисциплины имеются специальные помещения для проведения занятий лекционного типа, занятий лабораторного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы. Лабораторные работы проводятся в аудиториях 100-3, 106-3, 122б-3, 511б,г-3.

Перечень используемого лицензионного программного обеспечения MS Word, Matlab., «Компьютерный наноскоп».

Рабочую программу составил доц. каф. ФиПМ Абрамов Д.В.

(должность, ФИО, подпись)

Рецензент

Генеральный директор ООО «ФС Сервис» Д.С. Квасов

(место работы, должность, ФИО, подпись)

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ФиПМ

Протокол №1 от 30.08.2021 года

Заведующий кафедрой _____ С.М. Аракелян

(ФИО, подпись)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена

на заседании учебно-методической комиссии направления 01.04.02 Прикладная математика и информатика

Протокол №1 от 30.08.2021 года

Председатель комиссии _____ С.М. Аракелян

(ФИО, должность, подпись)

ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Рабочая программа одобрена на 20___ / 20___ учебный года

Протокол заседания кафедры № ___ от ___ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на 20___ / 20___ учебный года

Протокол заседания кафедры № ___ от ___ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на 20___ / 20___ учебный года

Протокол заседания кафедры № ___ от ___ года

Заведующий кафедрой _____