

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)



УТВЕРЖДАЮ
 Проректор
 по образовательной деятельности

А.А.Панфилов

« 02 » 09 20 19 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ
 (наименование дисциплины)

Направление подготовки **12.04.05 Лазерная техника и лазерные технологии**

Профиль/программа подготовки **Твердотельные и полупроводниковые лазерные системы.**

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	Зачёт с оценкой
Итого	3/108	18		18	72	зачёт с оценкой

Владимир 2019

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.

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
ПК-2 Способен проводить теоретические и экспериментальные исследования лазерной техники, лазерных оптико-электронных приборов и систем	частичное освоение	Знания: <ul style="list-style-type: none">• методы и средства измерений параметров лазерного излучения;• методы математического моделирования в области профессиональной деятельности;• требования безопасности при проведении экспериментальных исследований лазерной техники, лазерных оптико-электронных приборов и систем; Умения: <ul style="list-style-type: none">• измерять параметры лазерного излучения;• разрабатывать модели исследуемых процессов и явлений в области профессиональной деятельности;• участвовать в теоретических и экспериментальных исследованиях в области лазерной техники и лазерных технологий; Навыки: <ul style="list-style-type: none">• навыки целенаправленного планирования экспериментов;• проведения математических и физических экспериментов в области профессиональной деятельности и анализа их результатов;• навыки использования средств автоматизации при проведении экспериментальных исследований;
ПК-6 Способен	частичное	Знания:

разрабатывать элементы (в том числе активные) лазерных систем на основе наноструктурированных материалов	освоение	<ul style="list-style-type: none"> • основные физические принципы функционирования лазерных элементов, изготовленных на основе наноструктурированных материалов; • принципы технологии изготовления оптической керамики, в том числе лазерной нанокерамики; <p><i>Умения:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • разрабатывать элементы лазерных систем на основе наноструктурированных материалов; • анализировать свойства и характеристики наноструктурированных материалов, в том числе с использованием методов математического моделирования; <p><i>Навыки:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • навыки конструирования активных элементов лазерных систем, выполненных из наноструктурированных материалов; • навыки выполнения сравнительной оценки наноструктурированных материалов при планировании их использования в лазерных системах;
--	----------	---

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	20	1/25%	
2	Методы потенциала. Методы моделирования частица-частица	3	3-10	8	-	8	26	8/50%	Рейтинг-контроль 1
3	Моделирование из первых принципов. Квантово-механические методы моделирования.	3	11-18	8	-	8	26	8/50%	Рейтинг-контроль 2 Рейтинг-контроль 3
Всего за <u>3</u> семестр:		108		18	-	18	72	17/47%	Зачёт с Оценкой
Наличие в дисциплине КП/КР		-	-	-	-	-	-		
Итого по дисциплине		108		18	-	18	72	17/47%	Зачёт с Оценкой

Содержание лекционных занятий по дисциплине

Раздел 1. Введение в нанотехнологии. Основные понятия, явления и эффекты. (2 часа).

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

Содержание темы. Особенности моделирования нано объектов. Размерные эффекты. Изменения базовых свойств вещества при достижении критических размеров.

Раздел 2. Методы потенциала. Методы моделирования частица-частица (8 часов)

Тема 1. Потенциалы взаимодействия. (4 часа).

Содержание темы. Типы потенциалов. Потенциалы парного взаимодействия. Ближнедействующие и дальнедействующие потенциалы. Потенциалы учитывающие структурные особенности материалов. Принципы и алгоритмы стеганографии.

Тема 2. Методы моделирования частица-частица (4 часа).

Содержание темы. Методы частиц. Сеточные модели. Гибридные модели (частицы+сетка)

Модели с разномасштабными явлениями. Стационарные и динамические задачи моделирования. Гидродинамические методы моделирования движения частиц.

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

Тема 1. Моделирование из первых принципов. (4 часа).

Содержание темы. Моделирование структуры материалов из первых принципов. Метод Монте-Карло. Метод сильной связи. Полуэмпирические методы.

Тема 2 Квантово-механические методы моделирования. (4 часа).

Содержание темы. Содержание темы. Квантовый метод Монте-Карло. Объемные методы Монте-Карло. Метод Хартри-Фока. Моделирование структур кластеров из первых принципов. Теория функционала плотности.

Содержание лабораторных занятий по дисциплине

Раздел 1. Введение в нанотехнологии. Основные понятия, явления и эффекты. (2 часа).

Тема 1. Введение в Матлаб. (2 часа)

Содержание лабораторных занятий. Основные используемые функции Матлаб, используемые для моделирования НАНО.

Раздел 2. Методы потенциала. Методы моделирования частица-частица (8 часов).

Тема 1. Выполнение Лабораторная работа №3 «Потенциалы взаимодействия частиц».

Содержание лабораторных занятий. Выполнение лабораторной работы по индивидуальному заданию.

Тема 2 Лабораторная работа № 4 «Моделирование систем методом молекулярной динамики»

Содержание лабораторных занятий. Выполнение лабораторной работы по индивидуальному заданию.

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

Тема 1 Лабораторная работа № 1 «Квантовая модель одноэлектронного атома» (2 часа).

Содержание лабораторных занятий. Выполнение лабораторной работы по индивидуальному заданию.

Тема 2 Лабораторная работа № 2 «Многоэлектронные атомы». (2 часа).

Содержание лабораторных занятий. Выполнение лабораторной работы по индивидуальному заданию.

Тема 3. Лабораторная работа № 5 «Моделирование процесса формирования нанокластеров»

Содержание лабораторных занятий. Выполнение лабораторной работы по индивидуальному заданию. Защита лабораторных работ.

Задания к лабораторным работам:

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

2. Моделирование роста кластера с использованием потенциалов взаимодействия:

- потенциал Ленарда-Джонса;

- потенциал Бермингемма;

- потенциал Терсоффа;

- Потенциал Морзе;

3. Моделирование структуры наночастиц диаметрами (1-100нм) из первых принципов:

- углерод;

- золото;

- кремний

4. Расчет изменения теплоемкости частиц в зависимости от диаметра и структуры связей;
5. Моделирование процесса осаждения тонкой пленки с использованием методов Монте-Карло;
6. Моделирование процесса осаждения тонкой пленки 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:

- *Интерактивная лекция* (тема №1-3);
- *Групповая дискуссия* (Защиты лабораторных работ и обсуждение результатов);
- *Анализ ситуаций* (Выполнение лабораторных работ);
- *Применение имитационных моделей* (тема №2-3);
- *Разбор конкретных ситуаций* (Выполнение лабораторных работ);

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

Промежуточная аттестация проходит в форме зачёта с оценкой. Вопросы зачёта охватывают всю тематику, рассмотренную в течение семестра.

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.

Самостоятельная работа студентов включает в себя:

1. Разработку программ по моделированию формирования наноматериалов. Студент показывает программу преподавателю. Преподаватель тестирует её работу, слушает пояснения студента по сути реализованного алгоритма и способах его программной реализации.

2. Работу с дополнительной литературой по вопросам, связанным с материалом аудиторных занятий. Контроль осуществляется на экзамене. Студент должен продемонстрировать освоенные самостоятельно знания во время ответов на вопросы зачёта.

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 методы 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., Кортон В.С., Штанг Т.В.— Электрон. текстовые данные.— Екатеринбург: Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, 2014.— 120 с.	2014		http://www.iprbookshop.ru/68259.html — ЭБС «IPRbooks»
2. 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
3. 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	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.
5. Журналы института Иоффе. <http://www.ioffe.ru/index.php?row=30&subrow=0>

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.
3. <http://www.kxlab.com> - сайт кх-Лаборатории. Отправная точка поиска информации о новейших научных разработках в области вычислительной математики, автоматизации моделирования и программных продуктах.
4. www.csin.ru - Образовательный интернет-проект, посвященный computer science и смежным дисциплинам.
5. www.teorver.ru - Портал, посвященный таким разделам математики, как теория вероятностей, математическая статистика.

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) 5116-3 (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 "ВладИнТех" Осипов А.В. _____
(место работы, должность, ФИО, подпись)

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ФиПМ

Протокол № 1 от 02.09.2019 года

Заведующий кафедрой Аракелян С.М. _____
(ФИО, подпись)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 12.04.05. Лазерная техника и лазерные технологии

Протокол № 1 от 02.09.2019 года

Председатель комиссии Аракелян С.М. _____
(ФИО, 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 _____
