

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ПЕНЗЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ  
ФАКУЛЬТЕТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ

УТВЕРЖДАЮ  
Декан факультета ФВТ



Фионова Л.Р.

2016 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**М1.2.8.1 МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И МЕТОДЫ  
НАНОТЕХНОЛОГИЙ**

Направление подготовки 01.04.02 «Прикладная математика и информатика»

Магистерская программа «Математическое моделирование в экономике и

Квалификация (степень) выпускника – *магистр*

Форма обучения очная

Пенза, 2016

### 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий» являются

- формирование у студентов современного естественнонаучного мировоззрения;
- овладение общенаучными и общеинженерными дисциплинами на необходимом научном уровне;
- развитие логического и алгоритмического мышления.

### 2. Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры

Учебная дисциплина М1.2.8.1 «Математические модели и методы нанотехнологий» является дисциплиной по выбору. Данная дисциплина имеет логическую и содержательно-методологическую взаимосвязь с другими частями ООП, так как углубляет и закрепляет математические и естественнонаучные знания и навыки, сформированные в результате изучения дисциплин базовой части. Изучение данной учебной дисциплины базируется на знании дисциплин: «Математические модели физики», «Динамические системы», «Некорректные задачи, обратные задачи», «Непрерывные и дискретные математические модели», а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий»

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению:

Коды компетенций	Наименование компетенций	Структурные элементы компетенции (в результате освоения дисциплины обучающийся должен знать, уметь, владеть)
1	2	3
ПК-4	Способность разрабатывать концептуальные и теоретические модели решаемых задач проектной и производственно-технологической деятельности	<b>Знать:</b> основные понятия и определения нанотехнологий <b>Уметь:</b> классифицировать размерные эффекты в нанобластях <b>Владеть:</b> методами решения задач нанотехнологий
ПК-2	Способность разрабатывать анализировать концептуальные и теоретические модели решаемых научных проблем и	<b>Знать:</b> основные задачи, возникающие на стыке математического моделирования и

	задач	<p>нанотехнологии</p> <p><b>Уметь:</b> применять математический аппарат для моделирования поставленных задач, пользоваться современным программным обеспечением — пакетами Maple, MATLAB и Mathcad</p> <p><b>Владеть:</b> навыками формализации прикладных задач</p>
--	-------	--

#### 4. Структура и содержание дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий»

##### 4.1. Структура дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 ЗЕТ, 180 ч.

№ п/п	Наименование разделов и тем Дисциплины (модуля)	Семестр	Недели семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов в трудоемкость (в часах)								Формы текущего контроля успеваемости ( по неделям семестра)								
				Аудиторная работа				Самостоятельная работа												
				Всего	Лекция	Практические занятия	Лабораторные занятия	Всего	Подготовка к аудиторным занятиям	Реферат, эссе и др.	Курсовая работа (проект)	Подготовка к экзамену	Собеседование по лабораторным работам	Коллоквиум	Проверка тестов	Проверка контрольн. работ	Проверка реферата	Проверка эссе и иных творческих знаний	Курсовая работа (проект)	др.
1	<b>Раздел 1.</b> Математические модели и методы нанотехнологий	3		<b>18</b>	<b>6</b>	<b>6</b>	<b>6</b>	<b>30</b>	<b>20</b>	<b>10</b>			3			4	10			
1.1	Тема 1.1. Основные определения и понятия нанотехнологий	3	1-2	9	3	3	3	12	10	5			3			4	10			
1.2	Тема 1.2. Обзор существующих моделей и методов нанотехнологий	3	1-2	9	3	3	3	13	10	5			3			4	10			
2	<b>Раздел 2.</b> Метод R-функций моделирования задач нанотехнологий	3		<b>18</b>	<b>6</b>	<b>6</b>	<b>6</b>	<b>30</b>	<b>20</b>	<b>10</b>			3			12	10			
2.1	Тема 2.1. Учет геометрической мимметрии в задачах нанотехнологий	3	3-5	9	3	3	3	12	10	5			5			12	10			

2.2	Тема 2.2. Пространственные модели задач нанотехнологий	3	6-9	9	3	3	3	13	10	5			5			12	13			
3	<b>Раздел 3.</b> Модели молекулярной динамики	3		<b>18</b>	<b>6</b>	<b>6</b>	<b>6</b>	<b>30</b>	<b>20</b>	<b>10</b>			5			17	13			
3.1	Тема 3.1. Моделирование систем макромолекул	3	10-13	9	3	3	3	12	10	5			15			17	13			
3.2	Тема 3.2. Модели сплошной среды для изучения наносистем		14-17	9	3	3	3	13	10	5			15			17	13			
	<i>Курсовая работа (проект)</i>																			
	<i>Подготовка к экзамену</i>											36								
																Промежуточная аттестация				
																Форма		Семестр		
																		Зачет		
																		Экзамен		
																		1		

## 4.2. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
1.	Математические модели и методы нанотехнологий	Основные определения и понятия нанотехнологий. Обзор существующих моделей и методов нанотехнологий. Виды наноматериалов. Области нанотехнологий. Вычислительные проблемы нанотехнологий. Простейшие модели наносистем.
2.	Метод R-функций моделирования задач нанотехнологий	Учет геометрической симметрии в задачах нанотехнологий. Пространственные модели задач нанотехнологий. Построение структур решений, обладающих свойством полноты при моделировании задач нанотехнологий. Свойство самоподобия и фракталы в наносистемах.
3.	Модели молекулярной динамики	Моделирование систем макромолекул. Модели сплошной среды для изучения наносистем. Молекулярная динамика со связями для моделирования систем макромолекул. Моделирование методом Монте-Карло. Модели сплошной среды для изучения наносистем.

## 5. Образовательные технологии

В процессе изучения дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий» предполагается использовать структурно-логические и интеграционные образовательные технологии, реализуемые посредством:

- лекций в виде вводных, текущих, обзорных и заключительных обобщающих занятий;
- практических занятий с использованием методов «многократного повторения» (темы 1.1, 2.1, 3.1); по логике мышления - индуктивные, дедуктивные и репродуктивные.
- организации самостоятельной работы на основе личностнодифференцированного подхода планирования задания в виде воспроизводящей и частично-поисковой работ.
- организации текущего контроля знаний студентов методами: выполнения домашних заданий, оценки активности на практических занятиях и рейтинговой системы общей оценки знаний студентов.

Занятия, проводимые в интерактивных формах, с использованием интерактивных

технологий составляют 30% занятий.

В целях реализации индивидуального подхода к обучению студентов, осуществляющих учебный процесс по собственной траектории в рамках индивидуального рабочего плана, изучение данной дисциплины базируется на следующих возможностях: обеспечение внеаудиторной работы со студентами в том числе в электронной образовательной среде с использованием соответствующего программного оборудования, дистанционных форм обучения, возможностей интернет-ресурсов, индивидуальных консультаций и т.д.

**6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

**6.1. План самостоятельной работы студентов**

№ нед	Тема	Вид самостоятельной	Задание	Рекомендуем	Количество
1-2	Математические модели и методы нанотехнологий	Подготовка к аудиторным	Проработка конспекта лекций	П.7 а) 1 б) 1-2	25
3-9	Метод R-функций моделирования задач нанотехнологий	Подготовка к аудиторным занятиям	Проработка конспекта лекций	П.7 а) 1 б) 2	25
10 18	Модели молекулярной динамики	Подготовка к аудиторным занятиям	Проработка конспекта лекций	П.7 а) 1 б) 2	25

**6.2. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов**

- **Подготовка к аудиторным занятиям** проводится посредством изучения курса лекций, дополнительной литературы, а также решения предложенных задач.
- **Подготовка рефератов и докладов** осуществляется с использованием дополнительной литературы.
- **Подготовка к зачету** - изучение курса лекций, упражнения в решении типовых задач, изучение дополнительной литературы.

### 6.3. Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов

#### Контроль освоения компетенций

№ п\п	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых
1	Проверка реферата и заслушивание доклада	Разделы 1,2,3	ПК-4,2
2	Защита лабораторных работ	Разделы 1,2,3	ПК-4,2

#### Темы рефератов

1. Принцип параметризации и продолжительность моделирования
2. Фуллерены. Строение и физические свойства
3. Графеноподобные 2D структуры
4. 3D кристаллические структуры. Свойства, применение
5. Методы расчета наноструктур

#### Темы лабораторных работ

1. Метод Харди-Фока
2. Алгоритмы линейного скейлинга

#### 1.Собеседование №1 Лабораторная работа « Метод Харди-Фока»

Назовите основные группы методов, используемых для численного расчета равновесных геометрических и физических свойств многоатомных атомных кластеров.

2. Каковы основные особенности, достоинства и недостатки первопринципных методов расчета атомных кластеров?

3. Каковы основные особенности, достоинства и недостатки полуэмпирических методов расчета атомных кластеров?

4. Каковы основные особенности, достоинства и недостатки методов расчета атомных кластеров, основанные на использовании эмпирических потенциалов?

5. В чем заключается суть метода Хартри – Фока?

6. В чем заключается суть метода, основанного на формализме теории функционала плотности?

7. Что утверждает первая теорема Хоенберга – Кона?



## 2.Собеседование №2 Лабораторная работа «Алгоритмы линейного скейлинга»

1. Что такое алгоритм линейного скейлинга? Для чего он применяется?
11. Какие численные методы наиболее целесообразно использовать применительно к фуллереноподобным наноструктурам?
12. Какие численные методы целесообразно использовать применительно к нанотубулярным структурам?
13. Какие численные методы наиболее целесообразно использовать применительно к графеноподобным наноструктурам?
14. Какие численные методы целесообразно использовать применительно к 3D наноструктурам?

### Вопросы к экзамену

1. Основные определения и понятия нанотехнологий.
2. Обзор существующих моделей и методов нанотехнологий.
3. Виды наноматериалов.
4. Области нанотехнологий.
5. Вычислительные проблемы нанотехнологий.
6. Простейшие модели наносистем.
7. Учет геометрической симметрии в задачах нанотехнологий.
8. Пространственные модели задач нанотехнологий.
9. Построение структур решений, обладающих свойством полноты при моделировании задач нанотехнологий.
10. Свойство самоподобия и фракталы в наносистемах.
11. Моделирование систем макромолекул.
12. Модели сплошной среды для изучения наносистем.
13. Молекулярная динамика со связями для моделирования систем макромолекул.
14. Моделирование методом Монте-Карло.
15. Модели сплошной среды для изучения наносистем.
  
16. Что понимается под 3D супракристаллами? Из каких узловых элементов они состоят? Почему долгое время считалось, что двумерные кристаллы существовать не могут? Что такое графен? Какова история его создания? Каков тип гибридизации электронных орбиталей в графене?
  
17. Какие графеноподобные 2D кристаллы, состоящие из неуглеродных атомов, с тем же типом гибридизации электронных орбиталей, что и в графене, к настоящему времени получены?
18. Что такое сетки Кеплера? Каково их общее количество?
19. Что показывают индексы Шлефли в обозначении сеток Кеплера?
20. Что такое 2D супракристаллы? Чем они интересны? Каковы физические свойства графена и графеноподобных материалов, обуславливающие их практическое применение?

21. Каковы основные сферы применения графеноподобных 2D структур?
22. Какие способы придания графену полупроводниковых свойств известны?
23. Возможны ли естественные 2D пьезоэлектрики, которые не нужно «портить» перфорацией или допированием?

#### **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий»**

##### **а) Основная литература**

1. Головин Ю.И. Основы нанотехнологий . М: Машиностроение, 2012  
<https://e.lanbook.com/reader/book/5793/#2>

##### **б) дополнительная литература:**

1. Ибрагимов, И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем [Электронный ресурс] : учеб. пособие / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2010. — 384 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/156>.
2. Головин ЮИ Введение в нанотехнику <https://e.lanbook.com/reader/book/802/#1>

#### **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Занятия по дисциплине «Математические модели и методы нанотехнологий» проводятся в лекционных аудиториях университета.

Рабочая программа дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий» составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 01.04.02 «Прикладная математика и информатика»

Программу составил:

У. Семерич Ю.С.  к.т.н., доцент

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

Программа одобрена на заседании кафедры «Высшая и прикладная математика»

Протокол № 11.1 от «26» июня 2019 года

/ Зав. кафедрой  
д.ф.-м.н., профессор



Бойков И.В.

Программа согласована с заведующим выпускающей кафедрой «Высшая и прикладная математика»

Протокол № 11.1 от «26» июня 2019 года

/ Зав. кафедрой  
д.ф.-м.н., профессор



Бойков И.В.

Программа одобрена методической комиссией ФВТ

Протокол № 6<sup>а</sup> от «29» 06 2016 года

Председатель методической комиссии ФВТ

к.т.н., профессор



Коннов Н.Н.

Сведения о переутверждении программы на очередной учебный год и регистрации изменений

Учебный год	Решение кафедры (№ протокола, дата, подпись зав. кафедрой)	Внесенные изменения	Номера листов (страниц)		
			замененных	новых	аннулированных
2017 - 2018	л.п. от 04.09.17 Куз	Список литературы			
2018 - 2019	л.п. от 03.09.18 Куз	Список литературы			