

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ

Директор Инженерной школы
новых производственных
технологий

А.Н. Яковлев

« 30 » 06. 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ПРИЕМ 2019 г.
ФОРМА ОБУЧЕНИЯ очная

Моделирование наноматериалов

Направление подготовки/специальность	22.04.01 Материаловедение и технологии материалов		
Образовательная программа (направленность (профиль))	Производство изделий из наноструктурных материалов и аддитивные технологии		
Специализация	Производство изделий из наноструктурных материалов и аддитивные технологии -		
Уровень образования	высшее образование - магистратура		
Курс	2	семестр	3
Трудоемкость в кредитах (зачетных единицах)	6		
Виды учебной деятельности	Временной ресурс		
Контактная (аудиторная) работа, ч	Лекции		8
	Практические занятия		32
	Лабораторные занятия		24
	ВСЕГО		64
Самостоятельная работа, ч			152
ИТОГО, ч			216

Вид промежуточной аттестации

экзамен

Обеспечивающее подразделение

Отделение
материаловедения
ИШНПТ

Заведующий кафедрой -
руководитель ОМ на правах
кафедры ИШНПТ
Руководитель ООП

В.А. Клименов

Преподаватель

О.Л. Хасанов

Г.В. Лямина

2020 г.

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины является формирование у обучающихся определенного ООП (п. 5.4 Общей характеристики ООП) состава компетенций для подготовки к профессиональной деятельности.

Код компетенции	Наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенций		Составляющие результатов освоения (дескрипторы компетенции)	
		Код индикатора	Наименование индикатора достижения	Код	Наименование
ПК(У)-3	Способен исследовать состав и структуру веществ, с учетом специфики наноразмерных материалов, используя современное оборудование и программное обеспечение приборов	И.ПК(У)-3.4	Применяет методы математического моделирования для описания структуры объемных наноматериалов и свойств изолированных наночастиц	ПК(У)-3.4В1	Владеет опытом применения пакетов программ для моделирования геометрии и структуры материалов
				ПК(У)-3.4У1	Умеет использовать программы Avogadro, ABINIT, программное обеспечение приборов диагностики материалов для описания свойств и структуры наноматериалов.
				ПК(У)-3.4З1	Знает основные программы, используемые для моделирования наноматериалов их преимущества и ограничения.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП

Дисциплина относится к вариативной части Блока 1 учебного плана образовательной программы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

После успешного освоения дисциплины будут сформированы результаты обучения:

Планируемые результаты обучения по дисциплине		Индикатор достижения компетенции
Код	Наименование	
РД 1	Демонстрирует знания основных программ, использующихся для описания геометрии молекул, кластеров, наночастиц	И.ПК(У)-3.4
РД 2	Моделирует возможные свойства наноматериалов с использованием программного обеспечения приборов для диагностики наноматериалов	И.ПК(У)-3.4
РД 3	Создает модели атомов, кристаллических решеток, кластеров и наночастиц с использованием программ, находящихся в свободном доступе в сети Internet.	И.ПК(У)-3.4
РД 4	Демонстрирует знания методов, применяемых для математического моделирования динамики наносистем	И.ПК(У)-3.4
РД 5	Применяет методы математического описания динамики взаимодействующих частиц	И.ПК(У)-3.4
РД 6	Применяет модели кластерных систем	И.ПК(У)-3.4

Оценочные мероприятия текущего контроля и промежуточной аттестации представлены в календарном рейтинг-плане дисциплины.

4. Структура и содержание дисциплины

Основные виды учебной деятельности

Разделы дисциплины	Формируемый результат обучения по дисциплине	Виды учебной деятельности	Объем времени, ч.
Раздел (модуль) 1. Описание стационарных наносистем	РД1	Лекции	4
		Самостоятельная работа	8
	РД2	Практические занятия	4
		Лабораторные занятия	12
		Самостоятельная работа	36
	РД3	Практические занятия	4
		Лабораторные занятия	12
		Самостоятельная работа	36
Раздел (модуль) 2. Методы математического описания динамики наносистем	РД 4	Лекции	4
		Самостоятельная работа	8
	РД 5	Практические занятия	12
		Самостоятельная работа	32
	РД 6	Практические занятия	12
		Самостоятельная работа	32

Содержание разделов дисциплины:

Раздел 1. Описание стационарных наносистем

Темы лекций:

1. Введение. Компьютерные программы для построения моделей структуры молекул, кристаллических решеток (2 ч)
2. Программное обеспечение приборов, использующихся для диагностики наноматериалов (2 ч)

Темы практических занятий:

1. Входные данные для построения структуры молекулы (наночастицы, кластера). Обсуждение индивидуальных заданий (4 ч)
2. Входные данные для прогнозирования свойств объемных наноматериалов. Обсуждение индивидуальных заданий (6 ч)

Темы лабораторных занятий:

1. Построение молекул и кластеров в молекулярном редакторе Avogadro (4 часа).
2. Работа в ABINIT (программный пакет для расчета оптических, механических, колебательных и других наблюдаемых свойств материалов) (10 часов).
3. Обработка результатов исследования морфологии поверхности на атомно-силовом микроскопе (10 часов)

Раздел 2. Методы математического описания динамики наносистем

Темы лекций:

1. Математические модели динамики наносистем (2 ч)
2. Модели кластерных систем (2 ч)

Темы практических занятий:

1. Полуэмпирические методы. описания динамики наносистем (4 ч)
2. Молекулярные методы описания динамики наносистем (4 ч)
3. Методы Монте-Карло описания динамики наносистем (4 ч)
4. Модели атомной подвижности (4 ч)

5. Структурные модели кластера (4 ч)
6. Фрактальные кластеры (4 ч)

5. Организация самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов при изучении дисциплины (модуля) предусмотрена в следующих видах и формах:

- Работа с лекционным материалом
- поиск и обзор литературы и электронных источников информации по теме индивидуального проекта
- Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку
- Подготовка к оценивающим мероприятиям (экзамен);

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

6.1. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

1. Звонарев С.В. Моделирование структуры и свойств наносистем: учебно-методическое пособие / С. В. Звонарев, В. С. Кортон, Т. В. Штанг. – Екатеринбург: Изд-во Урал, ун-та, 2014.- 120 с. Схема доступа: <http://elar.urfu.ru/bitstream/10995/28065/1/978-5-7996-1203-0.pdf>

2. Александрова О.А., Новые наноматериалы. Синтез. Диагностика. Моделирование: лаб. практикум / А. Н. Алешин, А. О. Белорус, А. А. Бобков, А. В. Гузь, А. А. Кальнин, И. Е. Кононова, В. С. Левицкий, Д. С. Мазинг, Е. В. Мараева, Л. Б. Матюшкин, П. П. Москвин, В. А. Мошников, Е. Н. Муратова, С. С. Налимова, А. А. Пономарева, И. А. Пронин, Ю. М. Спивак под ред. В. А. Мошникова, О. А. Александровой. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2015. 248 с. Схема доступа: https://www.researchgate.net/publication/303688648_Novye_nanomaterialy_Sintez_Diagnostika_Modelirovanie

3. Порошки для изготовления керамики: учебное пособие [Электронный ресурс] / Г. В. Лямина [и др.]; Национальный исследовательский Томский политехнический университет (ТПУ). — 1 компьютерный файл (pdf; 3.3 МВ). — Томск: Изд-во ТПУ, 2014. — Заглавие с титульного экрана. — Электронная версия печатной публикации. — Доступ из корпоративной сети ТПУ. — Системные требования: Adobe Reader.

Схема доступа: <http://www.lib.tpu.ru/fulltext2/m/2015/m103.pdf>

Дополнительная литература (указывается по необходимости)

1. Чернышев, В.А. Моделирование наноструктур на основе применения программных пакетов CRYSTAL и ABINIT: Учебное пособие / Чернышев, В.А. Екатеринбург 2008. — 48 с. Схема доступа: http://elar.urfu.ru/bitstream/10995/1544/5/1334954_schoolbook.pdf

6.2. Информационное и программное обеспечение

1. Сравнение программного обеспечения для моделирования молекулярной механики
Схема доступа:

https://ru.qwe.wiki/wiki/Comparison_of_software_for_molecular_mechanics_modeling

2. Avogadro. молекулярный редактор
Схема доступа:

<https://sourceforge.net/projects/avogadro/files/avogadro2/>

3. ABINIT программный пакет для расчета оптических, механических, колебательных и других наблюдаемых свойств материалов. Схема доступа: <https://www.abinit.org/>

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы доступны по ссылке: <https://www.lib.tpu.ru/html/irs-and-pdb>

Лицензионное программное обеспечение (в соответствии с Перечнем лицензионного программного обеспечения ТПУ):

7-Zip;
 Adobe Acrobat Reader DC;
 Adobe Flash Player;
 AkelPad;
 Cisco Webex Meetings;
 Document Foundation LibreOffice;
 Google Chrome;
 Microsoft Office 2013 Standard Russian Academic;
 Mozilla Firefox ESR;
 ownCloud Desktop Client;
 Tracker Software PDF-XChange Viewer;
 WinDjView; Zoom Zoom

7. Особые требования к материально-техническому обеспечению дисциплины

В учебном процессе используется следующее лабораторное оборудование для практических и лабораторных занятий:

№	Наименование специальных помещений	Наименование оборудования
1.	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации 634028, Томская область, г. Томск, Ленина проспект, 2, строен. 1, 203	Комплект оборудования для проведения занятий по основным разделам дисциплины Доска аудиторная настенная - 1 шт.; Комплект учебной мебели на 42 посадочных мест; Компьютер - 2 шт.
2.	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (научная лаборатория) 634028, Томская область, г. Томск, Ленина проспект, д. 2, 039	Комплект оборудования для проведения лабораторных занятий по основным разделам дисциплины Дифрактометр рентгеновский Shimadzu XRD-7000S - 1 шт.; Компрессор поршневой Aircraft Mobilboy 311/50 - 1 шт.; Высокотемпер.печь СВК5163 - 1 шт.; Сканирующая зондовая нанолaborатория NT-MDT Ntegra Aura - 1 шт.; Высокотемпературный вакуумный дилатометр NETZSCH DIL 402 E/7/G-Рy - 1 шт.; Высокотемпературная вакуумная печь Nabertherm LHT 02/18 - 1 шт.; Комплект учебной мебели на 3 посадочных мест Компьютер - 4 шт.; Принтер - 1 шт.

Рабочая программа составлена на основе Общей характеристики образовательной программы по направлению 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов /

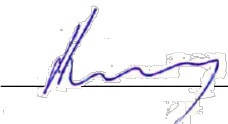
специализация «Производство изделий из наноструктурных материалов и аддитивные технологии» (приема 2019 г., очная форма обучения).

Разработчик(и):

Должность	ФИО
Доцент	Г.В. Лямина

Программа одобрена на заседании Отделения материаловедения ИШНПТ (протокол №19/1 от 01.07.2019).

Руководитель выпускающего отделения,
д.т.н, профессор

 /В.А. Клименов/

Лист изменений рабочей программы дисциплины:

Учебный год	Содержание /изменение	Обсуждено на заседании Отделения материаловедения (протокол)
2020/2021 учебный год	1. Обновлено программное обеспечение 2. Обновлен состав профессиональных баз данных и информационно-справочных систем 3. Обновлено содержание разделов дисциплины 4. Обновлен список литературы, в том числе ссылок ЭБС.	№ 36/1 от 01.09.2020 г.