

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ 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
---------------------------------	----------------	---------------------------------	---

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. 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.

3. 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

4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

4.1. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

1. Звонарев С.В. Моделирование структуры и свойств наносистем: учебно-методическое пособие / С. В. Звонарев, В. С. Кортков, 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>

4.2. 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