

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.02 Методы исследования и моделирования нанообъектов, приборов и нанотехнологических процессов

по направлению подготовки: 28.04.02 - «Наноинженерия»

Программа магистратуры: Наноструктурированные натуральные и искусственные материалы

Квалификация выпускника: МАГИСТР

Выпускающая кафедра: ПНТБМ

Кафедра-разработчик программы: ПНТБМ

1. Цели освоения дисциплины

- а) формирование знаний о принципах исследования и моделирования нанообъектов, приборов и нанотехнологических процессов,
- б) обучение принципам получения пространственных моделей наноструктур и биомолекул,
- в) обучение способам применения методов компьютерного моделирования при разработке нанообъектов и нанотехнологических процессов,
- г) раскрытие сущности квантовомеханических расчетов при моделировании нанообъектов и биомолекул

2. Содержание дисциплины

Общие сведения о компьютерном моделировании структур

Молекулярная механика и молекулярная динамика в компьютерном моделировании наноструктур

Биомолекулы: от воды до аминокислот

Биологические молекулы: структуры белков и нуклеотидов

Перспективы визуализации углеродных наноструктур в программных пакетах Matlab/Octave

3. В результате освоения дисциплины магистрант должен:

- 1) Знать:** а) Теоретические основы молекулярного моделирования нанообъектов
б) основные программные пакеты, применимые для моделирования нанообъектов и нанопроцессов
в) Основные направления в области теоретического изучения нанообъектов и нанопроцессов
- 2) Уметь:** а) Получать доступ к базам биомолекул и наноструктур в сети интернет
б) Проводить элементарные квантово-механические расчеты нанообъектов
в) Анализировать результаты молекулярного моделирования и сопоставлять с известными экспериментальными данными
- 3) Владеть:** а) Методами компьютерной визуализации нанообъектов и биомолекул
б) Методами квантово-механических расчетов при моделировании нанообъектов и биомолекул
в) Основными программными пакетами для моделирования нанообъектов и нанопроцессов

Зав.каф. ПНТБМ



Э.Ф. Вознесенский