

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«Казанский национальный исследовательский
технологический университет»
(ФГБОУ ВО «КНИТУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УР
Бурмистров А.В.
(подпись)
« 04 » 07 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

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

Направление подготовки
28.04.02 «Наноинженерия»

Направленность (профиль) программы
Наноструктурированные натуральные и искусственные материалы

Квалификация (степень) выпускника магистр
Форма обучения очная

Институт, факультет Институт нефти, химии и нанотехнологий, факультет наноматериалов и нанотехнологий
Кафедра-разработчик рабочей программы Плазмохимических и нанотехнологий высокомолекулярных материалов

Курс; семестр 1; 1

	Часы	Зачетные единицы
Лекции	18	0,5
Практические занятия	-	-
Лабораторные занятия	45	1,25
Самостоятельная работа	45	1,25
Экзамен	36	1
Всего	144	4

Казань, 2019 г.

Рабочая программа составлена с учетом требований Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (№ 919 от 19.09.2017) по направлению 28.04.02 «Наноинженерия», направленность (профиль) программы «Наноструктурированные натуральные и искусственные материалы» на основании учебного плана набора обучающихся 2019 года поступления. Примерная программа по дисциплине отсутствует.

Разработчик программы:

Зав. каф. ПНТВМ
(должность)


(подпись)

Э.Ф. Вознесенский
(Ф.И.О)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ПНТВМ, протокол № 15 от 02.07.2019 г.

Зав. кафедрой ПНТВМ, профессор



Э.Ф. Вознесенский

УТВЕРЖДЕНО

Протокол заседания методической комиссии факультета, реализующего подготовку образовательной программы, к которому относится кафедра-разработчик РП (ФНН) от 03.07.2019 г. № 21/2

Председатель комиссии, профессор



В.А. Сысоев

Зав. отделом магистратуры



Я.Р. Валитова

Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины ***Б1.В.02 «Методы исследования и моделирования нанообъектов, приборов и нанотехнологических процессов»*** являются

- 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. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина Б1.В.02 "Методы исследования и моделирования нанообъектов, приборов и нанотехнологических процессов" относится к *вариативной; обязательной* части ОП и формирует у магистрантов по направлению подготовки 28.04.02 - «Наноинженерия» набор знаний, умений, навыков и компетенций, необходимых для выполнения научно-исследовательской и инновационной; научно-педагогической деятельности

Знания, полученные при изучении дисциплины Б1.В.ОД.2 "Методы исследования и моделирования нанообъектов, приборов и нанотехнологических процессов" могут быть использованы при освоении последующих дисциплин учебного плана, прохождении практик, в написании выпускной квалификационной работы (диссертации магистра) и в дальнейшей научно-исследовательской и инновационной; научно-педагогической деятельности.

3. Компетенции магистранта, формируемые в результате освоения дисциплины Б1.В.02 "Методы исследования и моделирования нанообъектов, приборов и нанотехнологических процессов"

1. ПК-3 – Способен выполнять разработку и реализацию мероприятий по совершенствованию технологии производства наноструктурированных полимерных материалов;

2. ПК-4 – Способен организовывать работы по устранению причин брака наноструктурированных полимерных материалов;

3. ПК-10 – Способен выполнять контроль, мониторинг и измерение параметров технологических операций процесса производства изделий с наноструктурированными керамическими покрытиями;

4. ПК-14 – Способен выполнять контроль технологических параметров производства полимерных наноструктурированных пленок со специальными свойствами.

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

4. Структура и содержание дисциплины Б1.В.02 «Методы исследования и моделирования нанообъектов, приборов и нанотехнологических процессов»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Виды учебной работы (в часах)				Информационные и другие образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса	Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации по разделам
			Лекции	Семинар (Практические занятия)	Лабораторные работы	СРС		
1	Роль компьютерного моделирования в научном знании.	1	6		5	15	Работа с открытыми базами молекулярных моделей в сети Интернет. Использование ПО для визуализации молекулярных моделей	Контрольная работа, эссе, доклад
2	Биологическое молекулы, как объект моделирования.	1	6		4	15	Работа с открытыми базами молекулярных моделей в сети Интернет. Использование ПО для визуализации молекулярных моделей	Контрольная работа, эссе, доклад
3	Научная визуализация нанообъектов	1	6		36	15	Визуализация нанообъектов с применением ПО для математических расчетов и компьютерной графики	Контрольная работа, эссе, доклад
Форма аттестации							Экзамен	

5. Содержание лекционных занятий по темам с указанием формируемых компетенций.

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Тема лекционного занятия	Краткое содержание	Формируемые компетенции
1	Роль компьютерного моделирования в научном знании.	4	1. Общие сведения о компьютерном моделировании структур	Общие сведения о компьютерном моделировании структур Общие сведения о наночастицах и наносистемах Компьютерное моделирование как	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14

				новый инструмент вычислительной биологии	
		2	2. Молекулярная механика и молекулярная динамика в компьютерном моделировании наноструктур	Предпосылки молекулярного моделирования Молекулярная механика (классическая механика) Идея молекулярной динамики Уровни детализации молекулярного моделирования Файл координат атомов .pdb	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14
2	Биологические молекулы, как объект моделирования	4	3. Биомолекулы: от воды до аминокислот	Биологические молекулы, как объект моделирования. Молекула воды Биологические молекулы, как объект моделирования. Белки Аминокислоты Алифатические аминокислоты Алифатические аминокислоты с гидроксидной группой Кислотные аминокислоты и их производные Щелочные аминокислоты Ароматические аминокислоты Аминокислоты, содержащие серу Циклические аминокислоты	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14
		4	4. Биологические молекулы: структуры белков и нуклеотидов	Первичная структура белков Вторичная структура белков. α -спирали Вторичная структура белков. β -листы Вторичная	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14

				структура белков. Повороты и петли Третичная структура белков α -спиральный класс структур β -белки α/β и $\alpha + \beta$ -белки Нативное состояние белков Фолдинг белков Нуклеотиды ДНК РНК	
3	Научная визуализация нанообъектов	6	5. Перспективы визуализации углеродных наноструктур в программных пакетах Matlab/Octave	Возможности визуализации графеновых нанослоев, углеродных нанотрубок, фуллеренов	ПК-3, ПК-4, ПК- 10, ПК-14

6. Содержание практических/семинарских занятий

Учебным планом направления подготовки **28.04.02 «Наноинженерия»** проведение лабораторных работ по дисциплине **Б1.В.02 «Методы исследования и моделирования нанообъектов, приборов и нанотехнологических процессов»** не предусмотрено

7. Содержание лабораторных занятий

Сформулировать цель проведения лабораторных работ.

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Наименование лабораторной работы	Краткое содержание	Формируемые компетенции
1	Роль компьютерного моделирования в научном знании.	5	Практика работы с .pdb-моделями углеродных нанообъектов	Освоить навыки работы и визуализации компьютерных моделей биомолекул	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14
2	Биологические молекулы, как объект моделирования	4	Практика работы с архивом протеиновых структур WWPDB	Освоить навыки работы и визуализации компьютерных углеродных нанообъектов	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14
3	Научная визуализация нанообъектов	6	Визуализация структуры фрагмента графенового слоя	Рассчитать и построить средствами Matlab фрагмент графенового слоя	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14
		6	Визуализация структуры фрагмента	Воспроизвести	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14

			углеродной наноплёнки	программу визуализации углеродной наноплёнки по работе Н.В. Назаренко, И.Е. Еремин, А.А. Остапенко «Компьютерное моделирование атомного каркаса углеродных наноструктур» 2012 г. Произвести расчет и построение углеродной наноплёнки размером 1x1 нм, 3x3 нм, 5x5 нм 3. Сохранить результаты в виде графического файла	
		6	Визуализация структуры фрагмента углеродной нанотрубки	Построить в среде Matlab атомный скелет углеродной нанотрубки длиной 5 нм, состоящей из 12 углеродных шестигранников по окружности. Сохранить модель в виде графического файла. Построить в среде Matlab атомный скелет углеродной нанотрубки длиной 8 нм, состоящей из 18 углеродных шестигранников по окружности. Сохранить модель в виде графического файла	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14
		6	Визуализация атомного скелета фрагмента углеродной	Построить в среде Matlab атомный скелет углеродной нанотрубки длиной	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14

			нанотрубки	<p>5 нм, состоящей из 12 углеродных шестигранников по окружности. Сохранить модель в виде графического файла.</p> <p>Построить в среде Matlab атомный скелет углеродной нанотрубки длиной 8 нм, состоящей из 18 углеродных шестигранников по окружности. Сохранить модель в виде графического файла</p>	
		6	Визуализация структуры фрагмента фуллереноподобной структуры	<p>Построить в среде Matlab фуллереноподобную структуру. Основой построения являются аналитические формулы расчета координат усеченного икосаэдра (Weisstein Eric W. «Icosahedral group», Mathworld):</p>	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14
		6	Визуализация атомного скелета фрагмента фуллерена C60	<p>Соединить вершины модели фуллерена, построенной на практическом занятии № 6 в 6-ти и 5-тиугольники. Изменить параметры визуализации: толщина линий связи, размер сфер в вершине</p>	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14

8. Самостоятельная работа студента

№ п/п	Темы, выносимые на самостоятельную работу	Часы	Форма СРС	Формируемые компетенции
1	Применение метода Монте-Карло в квантово-механических расчетах	15	Написание и защита реферата	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14
2	Применение графических процессоров и суперкомпьютеров в квантово-механических расчетах	15	Написание и защита реферата	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14
3	Основные подходы в моделировании физических свойств нанобъектов	15	Написание и защита реферата	ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-14

9. Использование рейтинговой системы оценки знаний.

При оценке результатов деятельности обучающихся в рамках дисциплины **Б1.В.02 «Методы исследования и моделирования нанобъектов, приборов и нанотехнологических процессов»** используется рейтинговая система. Рейтинговая оценка формируется на основании текущего и промежуточного контроля. Максимальное и минимальное количество баллов по различным видам учебной работы описано в положении о рейтинговой системе.

Оценочные средства	Кол-во	Min, баллов	Max, баллов
Лабораторные работы	4	20	30
Контрольная работа	1	8	15
Реферат	1	8	15
Экзамен		24	40
Итого:		60	100

10. Информационно-методическое обеспечение дисциплины

10.1 Основная литература

При изучении дисциплины Б1.В.02 «Методы исследования и моделирования нанообъектов, приборов и нанотехнологических процессов» в качестве основных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу.

Основные источники информации	Количество экземпляров
<i>Вознесенский, Э.Ф. Компьютерная визуализация нанообъектов / Э.Ф.Вознесенский, И.В.Красина.- Казань: 2016.- 84 с., [2] с. ISBN: 978-5-7882-2003-1.</i>	66 экз. в УНИЦ КНИТУ
<i>Шабатина, Т. И. Нанохимия и наноматериалы : учеб. пособие/Т. И. Шабатина, А.М. Голубев. — М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014. — 63, [1]с. :ил. ISBN 978-5-7038-3965-2</i>	ЭБС «Лань» https://e.lanbook.com/reader/book/58569/#1 Доступ из любой точки Интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ
<i>Планирование виртуальных вычислений: Учебное пособие / Барский А.Б. - М.:ИД ФОРУМ, НИЦ ИНФРА-М, 2017. - 200 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование) (Переплёт 7БЦ) ISBN 978-5-8199-0655-2</i>	ЭБС «Znanium.com» http://znanium.com/bookread2.php?book=545303 Доступ из любой точки Интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ

10.2 Дополнительная литература

В качестве дополнительных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу:

Дополнительные источники информации	Количество экземпляров
<i>Поленов, Ю.В. Физико-химические основы нанотехнологий: руководство к практическим занятиям / Ю.В.Поленов, Е.В.Егорова; Иван. гос. хим.-технол. ун-т. – Иваново, 2009.- 68 с.</i>	ЭБС «Лань» https://e.lanbook.com/reader/book/4510/#1 Доступ из любой точки Интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ
<i>Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон. — 4-е изд. (эл.). —М. : Лаборатория знаний, 2017. — 522 с. : ил. – (Учебник для высшей школы). ISBN 978-5-00101-502-4</i>	ЭБС «Лань» https://e.lanbook.com/reader/book/94104/#1 Доступ из любой точки Интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ

<p>Каплан, И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, методы расчета и модельные потенциалы [Электронный ресурс] / И. Г. Каплан ; пер. с англ. — 2-е изд. (эл.). — М. : БИНОМ. Лаборатория знания, 2014.—397 с. : ил. ISBN 978-5-9963-2655-6</p>	<p>ЭБС «Лань» https://e.lanbook.com/reader/book/66358/#1 Доступ из любой точки Интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ</p>
<p>3. Вознесенский, Э.Ф.. Методы структурных исследований материалов. Методы микроскопии/ Абдуллин, И.Ш.; Шарифуллин, Ф.С..- Казань: 2014.- 182, [2] с.. ISBN: 978-5-7882-1545-7.</p>	<p>70 экз. в УНИЦ КНИТУ</p>

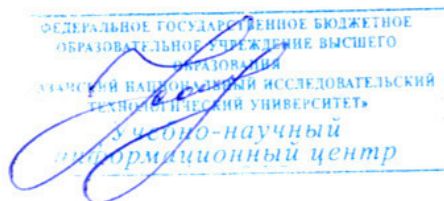
10.3 Электронные источники информации

При изучении дисциплины Б1.В.02 «Методы исследования и моделирования нанобъектов, приборов и нанотехнологических процессов» использование электронных источников информации:

1. ЭБС «Лань» – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/reader/books/>
2. ЭБС «Znanium.com» - Режим доступа: <http://znanium.com/>
3. Электронный каталог УНИЦ КНИТУ - Режим доступа: <http://ruslan.kstu.ru/>

Согласовано:

Зав.сектором ОКУФ



Усольцева И.И.

11. Оценочные средства для определения результатов освоения дисциплины

Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации обучающихся и итоговой (государственной итоговой) аттестации разрабатываются согласно положению о Фондах оценочных средств, рассматриваются как составная часть рабочей программы и оформляются отдельным документом.

12. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Материально-техническим обеспечением дисциплины Б1.В.02 "Методы исследования и моделирования нанообъектов, приборов и нанотехнологических процессов" являются: презентация, наборы слайдов, демонстрационные учебные и профессиональные научные приборы.

1. Лекционные занятия:

- a. Электронная презентация,*
- b. Раздаточный материал: микрофотографии, спектрограммы,*
- c. Интерактивные компьютерные модели наноструктур и биомолекул,*

2. Лабораторные занятия:

- a. Рабочее место студента, оснащенное компьютером с доступом в Интернет.*
- b. Программное обеспечение для визуализации биомолекул и наноструктур VMD*
- c. Программное обеспечение для математических расчетов и компьютерной визуализации Octave*

3. Прочее

- a. рабочее место преподавателя, оснащенное компьютером с доступом в Интернет.*

Учебным планом направления подготовки **28.04.02 «Наноинженерия»** по дисциплине Б1.В.02 «Методы исследования и моделирования нанообъектов, приборов и нанотехнологических процессов» не предусмотрено проведение занятий в интерактивной форме.