

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Методы моделирования и прогнозирования молекулярной структуры и свойств материалов

по направлению подготовки: 22.04.01 «Материаловедение и технологии материалов»

по направленности программы: «Плазменные методы получения и модификации наноматериалов»

Квалификация выпускника: МАГИСТР

Выпускающая кафедра: ПНТБМ

Кафедра-разработчик рабочей программы: «Плазмохимические и нанотехнологии высокомолекулярных материалов»

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Методы моделирования и прогнозирования молекулярной структуры и свойств материалов» являются:

- а) формирование знаний о принципах исследования и моделирования материалов,
- б) обучение принципам получения пространственных моделей структуры материалов,
- в) обучение способам применения методов компьютерного моделирования при исследовании структуры и свойств материалов.

2. Содержание дисциплины «Методы моделирования и прогнозирования молекулярной структуры и свойств материалов»

Роль компьютерного моделирования в научном знании. Биологические молекулы, как объект моделирования. Научная визуализация нанообъектов. Основные физические и механические свойства металлов, неорганических диэлектриков и полимеров.

Основные методы модификации свойств материалов. ВЧ плазменная модификация материалов при пониженных давлениях. Макроскопические модели ВЧ плазменной модификации материалов при пониженном давлении. Атомистические модели ВЧ плазменной модификации материалов при пониженном давлении.

3. В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- 1) Знать:
 - а) Теоретические основы молекулярного моделирования материалов
 - б) основные программные пакеты, применимые для моделирования материалов
 - в) Основные направления в области теоретического изучения материалов
- 2) Уметь:
 - а) Получать доступ к базам биомолекул и наноструктур в сети интернет
 - б) Проводить элементарные квантово-механические расчеты
 - 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 материалов