

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Директор по образовательной
деятельности

_____ С.Т. Князев
«__» _____

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1148509	Основы моделирования нанобъектов

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Наноинженерия	Код ОП 1. 28.03.02/33.01
Направление подготовки 1. Наноинженерия	Код направления и уровня подготовки 1. 28.03.02

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Звонарев Сергей Владимирович	Кандидат физико- математических наук, доцент	доцент	Физических методов и приборов контроля качества

Согласовано:

Управление образовательных программ

Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Основы моделирования нанообъектов

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль «Основы моделирования нанообъектов» посвящен изучению математических методов, используемых при современном компьютерном моделировании процессов и явлений в различных областях науки. В первой части курса рассматриваются общие сведения об информационных технологиях, моделировании, вычислительном эксперименте, математических моделях и методах. Вторая часть дисциплины посвящена описанию применения математического моделирования в физике, химии, биологии, а также изучаются вопросы применения методов математического моделирования для исследования структуры и физических свойств наноразмерных материалов.

1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Основы моделирования нанообъектов	3
ИТОГО по модулю:		3

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	1. Информационные технологии и сервисы
Постреквизиты и кореквизиты модуля	1. Математические основы профессиональной деятельности

1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Основы моделирования нанообъектов	ОПК-2 - Способен формализовывать и решать задачи, относящиеся к профессиональной деятельности, используя	З-1 - Привести примеры использования методов моделирования и математического анализа в решении задач, относящихся к профессиональной деятельности З-2 - Перечислить и дать краткую характеристику освоенным за время обучения пакетам прикладных программ,

	<p>методы моделирования и математического анализа</p>	<p>используемых для моделирования при решении задач в области профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Обоснованно выбрать возможные методы моделирования и математического анализа для предложенных задач профессиональной деятельности</p> <p>У-2 - Выбирать пакеты прикладных программ для использования их в моделировании при решении поставленных задач в области профессиональной деятельности</p> <p>П-1 - Решать поставленные задачи, относящиеся к области профессиональной деятельности, используя освоенные за время обучения пакеты прикладных программ для моделирования и математического анализа</p> <p>Д-1 - Способность к самообразованию, к самостоятельному освоению новых методов математического анализа и моделирования</p>
--	---	--

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Основы моделирования нанообъектов

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Звонарев Сергей Владимирович	Кандидат физико- математических наук, доцент	доцент	Физических методов и приборов контроля качества

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 9 от 14.05.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Звонарев Сергей Владимирович, доцент, Физических методов и приборов контроля качества

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Основные положения	
1.1	Введение	Краткая характеристика дисциплины, ее цели, задачи, объем, содержание, порядок изучения материала, связь с другими дисциплинами учебного плана. Форма контроля самостоятельной работы. Характеристика учебной литературы.
1.2	Основные положения	Информация. Виды существования информации. Количество информации. Единицы измерения информации. Информационные процессы. Свойства информации. Информационные ресурсы. Информационные технологии. Классы информационных технологий. Инструментарий информационных технологий. Этапы развития информационных технологий.
1.3	Классификация информационных технологий	Базовая ИТ. Уровни базовой ИТ. Виды базовой ИТ. Методы ИТ. Стандарты ИТ. Классификация информационных технологий - признаки классификации.
2	Информационные технологии	
2.1	Этапы разработки программ	Постановка задачи и математическое описание. Алгоритмизация. Составление программ, тестирование и отладка. Современные методы разработки программного обеспечения. Инструментарий программирования. Поколения

		языков программирования. Примеры языков и систем программирования.
2.2	Данные	Виды структур данных. Простые типы данных. Структурированные типы данных. Массивы. Строки. Записи. Множества. Пользовательские типы данных. Динамические структуры данных. Линейные списки. Стеки. Очереди. Бинарные деревья. Динамические массивы. Указатели. Классификация алгоритмов обработки. Алгоритм SPT. Алгоритм RR. Алгоритм FB. Алгоритм Макнотона. Алгоритм LPT. Алгоритмы сортировки.
2.3	БД и СУБД	Модели данных. Информация, данные, семантика и смыслы. Данные и их хранение. Записи, типы данных, наборы записей в БД. Банк и база данных. Требования к банкам данных. Классификация банка данных. Доступ к данным. Адресация и поиск записей. Функции СУБД. Организация СУБД.
2.4	Информационная безопасность	Уровни информационной безопасности. Механизмы безопасности. Угрозы информационной безопасности. Политика безопасности. Программно-технические меры. Криптографические методы.
3	Математическое моделирование	
3.1	Моделирование	Основные определения. Понятие моделирование и модель. Свойства моделей. Формы представления модели. Цели построения модели. Классификация моделей. Имитационное моделирование. Цель, виды и области применения имитационного моделирования. Статистическое моделирование. Метод Монте-Карло.
3.2	Математическая модель	Математические модели и их классификации. Обобщенная математическая модель. Построение математической модели. Блочный принцип построения математических моделей. Нелинейность математических моделей. Примеры построения математических моделей в различных областях. Модели в задачах механики жидкости, газа и плазмы, твердого и деформируемого тела. Математические модели в химии, построение кинетических моделей химических процессов. Модели эволюции и развития в биологии, модели распределения биологических систем.
3.3	Вычислительный эксперимент	Вычислительный эксперимент. Его основные этапы. Преимущества и сферы применения вычислительного эксперимента.
4	Компьютерное моделирование наносистем	
4.1	Расчеты «из первых принципов» и полуэмпирические методы	Методы математического описания динамики взаимодействующих частиц. Расчеты «из первых принципов»: метод Хартри-Фока, теория функционала плотности, модель ковалентной связи, метод валентных схем, метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы. Молекулярные методы: молекулярная механика, молекулярная динамика. Кинетический метод Монте-Карло.

4.2	Модели кластерных систем	Модели кластерных систем: модели атомной подвижности, термодинамическая модель, структурные модели кластеров, модели фракталов.
4.3	Математические модели транспортно-диффузионного переноса	Математические модели транспортно - диффузионного переноса. Модели заряжения и транспорта электронов в наноматериалах. Многомасштабное моделирование материалов и процессов. Концепция и классификация.

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	целенаправленная работа с информацией для использования в практических целях	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной успешной профессиональной деятельности Технология самостоятельной работы	ОПК-2 - Способен формализовывать и решать задачи, относящиеся к профессиональной деятельности, используя методы моделирования и математического анализа	Д-1 - Способность к самообразованию, к самостоятельному освоению новых методов математического анализа и моделирования

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основы моделирования нанообъектов

Электронные ресурсы (издания)

1. Калугян, К. Х.; Информатика. Информационные технологии и системы : учебное пособие.; Издательско-полиграфический комплекс РГЭУ (РИНХ), Ростов-на-Дону; 2018; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=567017> (Электронное издание)
2. Звонарев, С. В.; Моделирование структуры и свойств наносистем : учебно-методическое пособие.; Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, Екатеринбург; 2014; <http://www.iprbookshop.ru/68259.html> (Электронное издание)
3. Кирнос, В. Н.; Информатика 2. Основы алгоритмизации и программирования на языке C++ : учебно-методическое пособие.; Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Эль Контент, Томск; 2013; <http://www.iprbookshop.ru/14011.html> (Электронное издание)
4. Кирнос, В. Н.; Информатика II. Основы алгоритмизации и программирования на языке C++ : учебно-методическое пособие.; Эль Контент, Томск; 2013; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208651>

(Электронное издание)

5. Матюшкин, И. В.; Моделирование и визуализация средствами MATLAB физики наноструктур : учебно-методическое пособие.; РИЦ Техносфера, Москва; 2011; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=135405> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Звонарев, С. В.; Моделирование структуры и свойств наносистем : учебно-методическое пособие для студентов, обучающихся по направлению 210100-Электроника и микроэлектроника.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2014 (5 экз.)

2. Звонарев, С. В., Мазуренко, В. Г.; Основы математического моделирования : учебное пособие для студентов вуза, обучающихся по направлению подготовки 11.03.04 - Электроника и микроэлектроника.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2019 (10 экз.)

3. Ибрагимов, И. М., Ковшов, А. Н., Назаров, Ю. Ф.; Основы компьютерного моделирования наносистем : учеб. пособие.; Лань, Санкт-Петербург ; Москва ; Краснодар; 2010 (2 экз.)

4. Ибрагимов, И. М.; Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие [для вузов].; Лань, Санкт-Петербург [и др.]; 2010 (4 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

Полнотекстовая БД eLibrary - научная электронная библиотека (<http://elibrary.ru>).

Научно-технический шлюз (<https://nanohub.org/>).

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Министерство образования и науки Российской Федерации (<http://минобрнауки.рф/>).

Федеральный портал «Российское образование» (<http://www.edu.ru/>).

ООО Научная электронная библиотека (<http://elibrary.ru/defaultx.asp>).

Зональная научная библиотека УрФУ(<http://lib.urfu.ru>).

Электронный научный архив УрФУ (<https://elar.urfu.ru>).

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основы моделирования нанобъектов

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
-------	--------------	---	---

1	Практические занятия	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Office 365 EDUA1 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr Student EES</p> <p>Turbo Pascal 7.0 for DOS</p>
2	Самостоятельная работа студентов	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Office 365 EDUA1 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr Student EES</p> <p>Turbo Pascal 7.0 for DOS</p>
3	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Оборудование, соответствующее требованиям организации учебного процесса в соответствии с санитарными правилами и нормами</p>	Не требуется