

**Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
"Ивановский государственный политехнический университет"**

УТВЕРЖДАЮ

Директор института _____

_____ 2026 г.

Моделирование наносистем

рабочая программа дисциплины (модуля)

Закреплена за кафедрой	ЕНИТБ (Естественных наук и техносферной безопасности)		
Учебный план	28.03.02 Наноинженерия; 08.03.01 Строительство		
Направленность (профиль)	Инженерия нанокompозитных материалов в строительстве		
Квалификация	бакалавр		
Форма обучения	очная		
Общая трудоемкость	2 ЗЕТ		
Часов по учебному плану	64	Виды контроля в семестрах: зачет, 7 семестр	
в том числе:			
аудиторные занятия	26		
самостоятельная работа	38		

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр	7		Итого	
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	14	14	14	14
Практические	12	12	12	12
Итого ауд.	26	26	26	26
Контактная работа	26	26	26	26
Сам. работа	38	38	38	38
Часы на контроль				
Итого	64	64	64	64

Программу составил(и):

Красильников И.В., Зав.кафедрой, _____

Рецензент(ы):

Коновалова В.С., профессор, _____

Рабочая программа дисциплины

Моделирование наносистем

Разработана в соответствии с ФГОС ВО

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат по направлению подготовки 28.03.02 Наноинженерия. Утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 19 сентября 2017 г. N 923

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат по направлению подготовки 08.03.01 Строительство (Приказ Минобрнауки России от 31.05.2017 г. № 481)

составлена на основании учебного плана

28.03.02 Наноинженерия; 08.03.01 Строительство

утвержденного ученым советом вуза от 26.03.2026 протокол №6

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры

ЕНиТБ (Естественных наук и техносферной безопасности)

Зав. кафедрой И.В. Красильников _____

Согласовано

Зав. выпускающей кафедрой ЕНиТБ Красильников И.В. _____

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)	
Цели:	Формирование у обучающихся системных знаний и практических навыков в области математического и компьютерного моделирования структуры, свойств и физико-химических процессов в наносистемах, необходимых для проектирования, анализа и сопровождения производства нанокompозитных материалов в строительстве и нанотехнологии
Задачи:	— изучить теоретические основы, классификацию и области применения методов многомасштабного компьютерного моделирования наносистем. — освоить математические модели динамики, взаимодействия и самоорганизации наночастиц, включая построение потенциальных полей и анализ структурных параметров. — научиться применять численные методы (молекулярная динамика, Монте-Карло, метод дискретных элементов) для исследования однокомпонентных, двухкомпонентных и фрактальных наносистем. — исследовать транспортно-диффузионные процессы, механизмы заряжения и переноса электронов в наноструктурированных материалах. — получить практические навыки работы с специализированным программным обеспечением, визуализации результатов моделирования и интерпретации полученных данных. — развить способность использовать результаты компьютерного моделирования при разработке проектной документации и оптимизации состава нанокompозитов для строительных применений.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ	
Цикл (раздел) ОП:	Б1.О.03.11
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:
	Обучающийся должен Знать: основы квантовой механики, химии и численных методов. Уметь: применять математический аппарат для решения естественнонаучных задач. Владеть: базовыми навыками работы с ПК, прикладным программным обеспечением и методами визуализации данных.
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:
	Раздел 4. Реализация процессов синтеза нанокompозитных материалов, Производственная практика (преддипломная практика), Выполнение и защита выпускной квалификационной работы (Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы)

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ИНДИКАТОРЫ ИХ ДОСТИЖЕНИЯ	
ОПК-дк-7:Способен проектировать и сопровождать производство технических объектов, систем и процессов в области нанотехнологии	
ОПК-дк-7.1. Показывает знания правил разработки проектной документации; способы моделирования с использованием программных средств компьютерной графики	
В результате освоения дисциплины (модуля) обучающийся должен:	
Знать:	основные математические модели динамики наносистем и методы описания взаимодействия частиц; классификацию методов компьютерного моделирования (МД, МК, МДЭ, DFT, континуальные модели) и границы их применимости; особенности формирования кластерных, фрактальных и регулярных наносистем; принципы построения потенциальных полей и моделирования транспортно-диффузионных процессов; правила оформления проектной документации и стандартов в нанотехнологии
Уметь:	выбирать адекватные математические модели и численные методы для конкретных задач моделирования нанокompозитов; настраивать входные параметры, граничные условия и запускать расчёты в специализированных программных комплексах; проводить анализ радиальных функций распределения, координатных чисел, потенциальных полей и структурных параметров; визуализировать результаты моделирования с использованием средств компьютерной графики; сопоставлять результаты моделирования с экспериментальными данными и техническими требованиями.
Владеть:	навыками практического использования ПО для многомасштабного моделирования наносистем и нанокompозитов; методикой постановки и проведения вычислительных экспериментов по исследованию физико-химических свойств наночастиц; инструментами анализа транспортных, диффузионных и электростатических процессов в строительных нанокompозитах; способностью оформлять расчётно-графическую документацию и отчёты по результатам моделирования в соответствии с отраслевыми стандартами

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)			
Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Примечание
Раздел 1. Введение в компьютерное моделирование наносистем Тема 1. Предмет и методы наномоделирования Тема 2. Многомасштабный подход Тема 3. Обзор программных комплексов Тема 4. Классификация наносистем			
/Лек/	7	2	
/Пр/	7	2	
/СР/	7	4	
Раздел 2. Математические модели динамики и взаимодействия частиц Тема 5. Межатомные потенциалы (Леннард-Джонса, Морзе, ЕАМ). Тема 6. Уравнения движения. Тема 7. Термостаты и баростаты. Тема 8. Модели кластерных систем. Тема 9. Анализ координационных чисел.			
/Лек/	7	4	
/Пр/	7	2	
/СР/	7	4	
Раздел 3. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло Тема 10. Алгоритмы интегрирования (Верле, Ньютон). Тема 11. Статистические ансамбли. Тема 12. Метод Монте-Карло для равновесных свойств. Тема 13. Граничные условия периодичности.			
/Лек/	7	2	
/Пр/	7	2	
/СР/	7	8	
Раздел 4. Моделирование структуры и свойств кластерных и фрактальных наносистем Тема 14. Алгоритмы DLA и формирование фрактальных кластеров. Тема 15. Радиальная функция распределения: расчёт и анализ. Тема 16. Моделирование самоорганизации наночастиц при осаждении. Тема 17. Двухкомпонентные наночастицы			
/Лек/	7	2	
/Пр/	7	2	
/СР/	7	8	
Раздел 5. Транспортно-диффузионные и электростатические модели Тема 18. Уравнения диффузии в наноструктурах. Тема 19. Модели заряжения материалов, транспорт электронов. Тема 20. Построение потенциальных полей методом дискретных элементов. Тема 21. Анализ полей для заданного числа трансляционных уровней			
/Лек/	7	2	
/Пр/	7	2	
/СР/	7	7	
Раздел 6. Практическое моделирование нанокомпозитов для строительных материалов Тема 22. Интеграция моделей в задачи инженерии строительных композитов. Тема 23. Визуализация и постобработка. Тема 24. Оформление проектной документации и отчётов.			
/Лек/	7	2	
/Пр/	7	2	
/СР/	7	7	
/За/	7	0	

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В рамках внутренней системы оценки качества подготовки для текущего контроля и промежуточной аттестации в университете применяется балльно-рейтинговая система оценки знаний обучающихся (очной формы обучения). При реализации образовательной программы в университете применяются электронное обучение и дистанционные образовательные технологии.

Для проведения аудиторной и внеаудиторной контактной работы используются технологии видеоконференцсвязи.

Для проведения всех видов занятий используется электронная информационно-образовательная среда вуза.

При реализации различных видов учебной работы по дисциплине используются следующие образовательные технологии:

- 1) лекции с использованием методов проблемного изложения материала;
- 2) на практических занятиях для пробуждения у обучающихся интереса и эффективного усвоения учебного материала используются следующие методы активного обучения:
 - презентации с использованием различных вспомогательных средств: видео, слайдов, компьютеров;
 - мини-лекция: эффективная форма преподнесения теоретического материала;
 - тестирование: определение уровня информированности обучающихся или их отношение к обсуждаемой теме;
 - обратная связь: позволяет выяснить реакцию участников на обсуждаемые темы, увидеть достоинства и недостатки организации и проведения обучения, оценить результат;
 - дискуссии: позволяют выявить индивидуальное мнение обучающихся по определенной теме.

6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

ВОПРОСЫ К ЗАЧЕТУ

1. Понятие наносистемы. Многомасштабный подход в компьютерном моделировании. Классификация методов моделирования и границы их применимости.
2. Основные математические модели динамики наносистем. Уравнения движения и методы их численного интегрирования.
3. Межатомные потенциалы (парные, многочастичные, embedded-atom). Выбор потенциала в зависимости от моделируемой наносистемы.
4. Метод молекулярной динамики: алгоритмы, граничные условия, термостаты. Обеспечение статистической репрезентативности расчётов.
5. Метод Монте-Карло в наносистемах: принципы, статистические ансамбли, применение для расчёта равновесных и термодинамических свойств.
6. Метод дискретных элементов (DEM) и его применение для моделирования кластерных систем и гранулированных наноматериалов.
7. Координационное число в наносистемах: физический смысл, расчёт, влияние на механические и термодинамические свойства.
8. Моделирование фрактальных кластеров: алгоритмы агрегации, параметр фрактальной размерности, анализ морфологии.
9. Радиальная функция распределения (RDF): методика расчёта, физическая интерпретация, использование для диагностики структуры наносистем.
10. Моделирование самоорганизации наночастиц при осаждении из коллоидных растворов. Факторы, влияющие на формирование регулярных структур.
11. Построение потенциального поля в наносистемах. Методика расчёта и визуализация для заданного числа трансляционных уровней.
12. Математические модели диффузии в наноматериалах. Учёт размерных эффектов и поверхностной диффузии.
13. Модели заряжения материалов и транспорта электронов в наносистемах. Электростатическое взаимодействие наночастиц.
14. Программные комплексы для моделирования наносистем: архитектура, организация вычислительного эксперимента, анализ выходных данных.
15. Визуализация структуры и свойств наносистем с использованием программных средств компьютерной графики.
16. Моделирование двухкомпонентных наночастиц: особенности настройки параметров, анализ межфазных взаимодействий.
17. Применение результатов компьютерного моделирования при проектировании наноконструкций для строительных материалов.
18. Правила оформления проектной документации и отчётов по результатам моделирования. Критерии верификации и валидации расчётных моделей.

ФОС по дисциплине представлен в ПРИЛОЖЕНИИ к РПД.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1. Рекомендуемая литература

7.1.1 Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие, назначение, ссылка	Издательство, год
Л1.1	Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф.	Основы компьютерного моделирования наносистем: учебное пособие для вузов., ,	Санкт-Петербург: Лань, 2026,
Л1.2	Звонарев С.В., Кортон В.С., Штанг Т.В.	Моделирование структуры и свойств наносистем: учебно-методическое пособие., ,	Екатеринбург: УрФУ, 2014.,
Л1.3	Заводинский, В.Г.	Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем: учебное пособие, ,	Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2013.,

7.1.2 Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие, назначение, ссылка	Издательство, год
Л2.1	Юрчук, С.Ю.	Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур: моделирование наносистем методами молекулярной динамики: учебное пособие. , ,	Москва: МИСИС, 2013.,
Л2.2	Власов А. И., Назаров А. В.; под редакцией В. А. Шахнова	Учебно-методический комплекс по тематическому направлению деятельности ННС «Наноинженерия: учебное пособие: в 17 книгах. – Книга 14: Основы моделирования микро- и наносистем , ,	Москва: МГТУ им. Баумана, 2011,

7.2. Электронные учебные издания и электронные образовательные ресурсы

E-learning Портал электронного образования ИВГПУ: <https://moodle.ivgpu.ru/>

7.3. Информационное обеспечение дисциплины	
7.3.1 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства	
	Лицензионное программное обеспечение вуза: Microsoft Windows, Microsoft Office. Свободно распространяемое: программный пакет Moodle. Прикладное программное обеспечение: Google Chrome, Opera, Mozilla Firefox и др.
7.3.2 Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем	
7.3.2.1	ЭБС издательства "Лань", https://e.lanbook.com/
7.3.2.2	Электронная библиотека ИВГПУ, https://lib.ivgpu.ru/
7.3.2.3	ЭБС "Университетская Библиотека Онлайн", https://biblioclub.ru

8. МТО (ОБОРУДОВАНИЕ И ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА ОБУЧЕНИЯ)
Для проведения занятий по дисциплине имеются аудитории для лекционных и практических занятий, оснащенные ученической доской, комплектом учебной мебели. Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащено компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду Университета.

9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Обучающимся необходимо ознакомиться: - с содержанием рабочей программы изучаемой дисциплины (далее - РПД), с целями и задачами дисциплины, ее связями с другими дисциплинами образовательной программы, с основной и дополнительной литературой, в частности с методическими разработками по данной дисциплине. Для успешного усвоения теоретического материала необходимо регулярно посещать лекции, активно работать на практических занятиях и лабораторных работах, перечитывать лекционный материал, значительное внимание уделять самостоятельному изучению дисциплины. - Основными видами аудиторной работы обучающихся являются лекционные занятия. В ходе лекций преподаватель излагает и разъясняет основные, наиболее сложные понятия темы, а также связанные с ней теоретические и практические проблемы. В ходе лекционных занятий необходимо вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации, положительный опыт в изучении проблем. Конспектирование лекций – сложный вид вузовской аудиторной работы, предполагающий интенсивную умственную деятельность студента. - Практические занятия служат для закрепления изученного материала, развития умений, навыков и защиты выдвигаемых положений, а также для контроля преподавателем степени подготовленности обучающихся по изучаемой дисциплине. Практическое занятие – это занятие, проводимое под руководством преподавателя в учебной аудитории, направленное на углубление научно-теоретических знаний и овладение определенными методами самостоятельной работы. В процессе таких занятий вырабатываются практические умения. Перед практическим занятием следует изучить конспект лекции и рекомендованную преподавателем литературу, обращая внимание на практическое применение теории и на методику решения типовых задач. Логическая связь лекций и практических занятий заключается в том, что информация, полученная на лекции, в процессе самостоятельной работы на практическом занятии осмысливается и перерабатывается, при помощи преподавателя анализируется до мельчайших подробностей, после чего прочно усваивается. - Целью самостоятельной работы является освоение фундаментальных знаний, развитие ответственности и организованности, умений самостоятельно работать с учебным материалом и приобретение навыков поиска и реферирования доступной научной информации. Самостоятельная работа во внеаудиторное время подразумевает: повторение лекционного материала; изучения учебной и научной литературы; подготовки к контрольным работам, тестированию, рубежному контролю.

10. УСЛОВИЯ РЕАЛИЗАЦИИ ООП ВО ДЛЯ ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ И ИНВАЛИДОВ

Преподавание дисциплины должно учитывать особенности познавательной деятельности и личностной особенности обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) и инвалидов (по возможности на лекциях, семинарах, лабораторных работах и т.д.). Учет особенностей обучающихся с инвалидностью в полной мере проявляется на предусмотренных для таких обучающихся индивидуальных консультациях по дисциплине.

Необходимо во время преподавания в общей группе учитывать реальные возможности лиц с ОВЗ и инвалидов. Коррекция методики преподавания для данной группы лиц возможна на индивидуальных занятиях. Преподаватель должен учитывать физиологические особенности обучаемого и разработать рекомендации и приемы выполнения поставленной задачи индивидуально. Возможен подбор индивидуального задания с коррекцией уровня сложности выполняемого задания.

Специальные условия для получения образования обучающимися с ограниченными возможностями здоровья условия обучения, воспитания и развития таких обучающихся, включающие в себя использование специальных образовательных программ и методов обучения и воспитания, специальных учебников, учебных пособий и дидактических материалов, специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования, предоставление услуг ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь, проведение групповых и индивидуальных коррекционных занятий, обеспечение доступа в здания организаций, осуществляющих образовательную деятельность, и другие условия, без которых невозможно или затруднено освоение образовательных программ обучающимися с ограниченными возможностями здоровья.

При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья электронное обучение и дистанционные образовательные технологии должны предусматривать возможность приема-передачи информации в доступных для них формах.

Необходимо учитывать тот факт, что обучающиеся не всегда имеют физическую возможность посещать занятия. Поэтому целесообразно разрабатывать дистанционную информационную поддержку процесса обучения. Таким средством могут являться обучающие компьютерные фильмы по данной дисциплине, презентации, которые обучающийся может просматривать дома в комфортной среде и без лимита времени.

Обучающиеся из числа лиц с ОВЗ и инвалидов обеспечиваются печатными и (или) электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

При проведении занятий в компьютерных лабораториях целесообразно использовать проектор для наиболее удобного размещения обучающегося с ОВЗ при изложении материала занятия.