

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
**«БЕЛГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ им. В.Г. ШУХОВА»**  
(БГТУ им. В.Г. Шухова)

УТВЕРЖДАЮ  
Директор института ХТИ

 В.И. Павленко  
« 15 » 09 2016 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**  
дисциплины (модуля)

**Компьютерное моделирование систем и технологий в наноинженерии**

направление подготовки бакалавриата:

**28.03.02 – Наноинженерия**

профиль:

**Безопасность систем и технологий наноинженерии**

Квалификация

**бакалавр**

Форма обучения

**очная**


**Институт: химико-технологический**

**Кафедра: безопасности жизнедеятельности**


Белгород – 2016

Рабочая программа составлена на основании требований:

- Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки – 28.03.02 Наноинженерия (уровень бакалавриата), утвержденного приказом Министерства образования Российской Федерации №1414 от 03.12.2015;
- плана учебного процесса БГТУ им. В.Г. Шухова, введенного в действие в 2016 году.

Составитель (составители): канд. техн. наук, доцент  (А.Ю. Семейкин)


Рабочая программа согласована с выпускающей кафедрой Безопасности жизнедеятельности

Заведующий кафедрой: д-р техн. наук, проф.  (А.Н. Лопанов)

« 5 » сентября 2016 г.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры

« 6 » сентября 2016 г., протокол № 2

Заведующий кафедрой: д-р техн. наук, проф.  (А.Н. Лопанов)

Рабочая программа одобрена методической комиссией института

« 15 » 09 2016 г., протокол № 1

Председатель канд. техн. наук, доц.  (Л.А. Порожнюк)

## 1. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Формируемые компетенции			Требования к результатам обучения
№	Код компетенции	Компетенция	
<b>Общекультурные</b>			
1	ОК-10	Способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом требований информационной безопасности	В результате освоения дисциплины обучающийся должен: <b>Знать:</b> виды, классификацию, основные принципы работы информационно-коммуникационных технологий; основные требования информационной безопасности <b>Уметь:</b> решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры; <b>Владеть:</b> навыками решения стандартных задач профессиональной деятельности с применением информационно-коммуникационных технологий
<b>Общепрофессиональные</b>			
2	ОПК-4	Способность работать с компьютером как средством управления информацией	В результате освоения дисциплины обучающийся должен: <b>Знать:</b> основы информатики и информационно-коммуникационных технологий, принципы работы компьютерной техники; <b>Уметь:</b> использовать возможности компьютерной техники и информационно-коммуникационных технологий для решения профессиональных задач <b>Владеть:</b> навыками работы с компьютерной техникой как средством управления информацией

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Содержание дисциплины основывается и является логическим продолжением следующих дисциплин:

№	Наименование дисциплины (модуля)
1	Безопасность жизнедеятельности
2	Информатика
3	Введение в наноинженерию
4	Физико-химические основы нанотехнологии
5	Мониторинг безопасности наноинженерных технологий

Содержание дисциплины служит основой для изучения следующих дисциплин:

№	Наименование дисциплины (модуля)
1	Физико-химические основы нанотехнологии
2	Расчет и проектирование систем безопасности труда
3	Дипломное проектирование

### 3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 7 зач. единиц, 252 часа.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестр №7
Общая трудоемкость дисциплины, час	252	252
<b>Контактная работа (аудиторные занятия), в т.ч.:</b>	85	85
лекции	34	34
лабораторные		
практические	51	51
<b>Самостоятельная работа студентов, в том числе:</b>	167	167
Курсовой проект	54	54
Курсовая работа		
Расчетно-графическое задания		
Индивидуальное домашнее задание		
<i>Другие виды самостоятельной работы</i>		
Форма промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	36	36

### 4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### 4.1 Наименование тем, их содержание и объем

#### Курс 4 Семестр 7

№ п/п	Наименование раздела (краткое содержание)	Объем на тематический раздел по видам учебной нагрузки, час			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа
1	2	3	4	5	6
<b>1.</b>	<b>Введение в дисциплину. Основные понятия.</b>	<b>8</b>	<b>12</b>		<b>16</b>
1.1	Математические модели и их классификация; вычислительный эксперимент как основа компьютерного моделирования.				
1.2	Современное состояние теоретических подходов к моделированию наноразмерных систем.				

1.3	Физико-химические модели структуры нанообъектов. Классификация методов моделирования строения молекул, супрамолекулярных систем, кластеров, полимеров, кристаллов, наноструктур.				
<b>2</b>	<b>Теоретические основы математического и компьютерного моделирования</b>	<b>10</b>	<b>6</b>		<b>15</b>
2.1.	Краевые задачи математической физики как математическая основа компьютерного моделирования;				
2.2	Понятие о численных методах решения краевых задач;				
2.3	Понятие о методе Монте-Карло;				
2.4	основные типы физико-математических задач моделирования технологических процессов.				
2.5	Использование структурных, спектроскопических и термодинамических данных для построения начальных моделей. Межчастичное взаимодействие.				
<b>3</b>	<b>Стандартные методы моделирования физических, химических и биологических процессов в наносистемах.</b>	<b>10</b>	<b>24</b>		<b>34</b>
3.1	Квантово-химическое описание химических реакций. Поверхность потенциальной энергии химической реакции.				
3.2	Методы описания химических реакций.				
3.3	Индексы реакционной способности. Электростатический потенциал. Взаимодействие атомов и молекул с поверхностью.				
3.4	Моделирование периодических атомных и молекулярных систем.				
3.5	Зонная структура и свойства твердых тел. Кластерное приближение. Электронное строение периодических наноструктур.				
<b>4</b>	<b>Моделирование безопасной производственной среды в нанотехнологиях</b>	<b>6</b>	<b>9</b>		<b>12</b>
4.1	Моделирование системы освещения производственного помещения				
4.2	Моделирование шумовой обстановки в производственном помещении				
	<b>ВСЕГО</b>	<b>34</b>	<b>51</b>		<b>77</b>

#### 4.2. Содержание практических (семинарских) занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Тема практического (семинарского) занятия	К-во часов	К-во часов СРС
семестр №7				
1	Введение в дисциплину. Основные понятия.	Основы моделирования с использованием программных комплексов MathCad и MathLab	6	6
2		Моделирование и оптимизация свойств	6	6

		объекта исследования с использованием метода математического планирования эксперимента		
3	Теоретические основы математического и компьютерного моделирования	Моделирование движения электрона через потенциальный барьер конечной длины	6	6
4	Стандартные методы моделирования физических, химических и биологических процессов в наносистемах.	Моделирование энергетического спектра электрона в твердом теле	6	6
5		Основы моделирования в программном комплексе Comsol Multiphysics	6	6
6		Моделирование процесса диффузии	6	6
7		Моделирование процессов тепло- и массопереноса	6	6
8	Моделирование безопасной производственной среды в нанотехнологиях	Моделирование освещения производственного помещения в программном комплексе Dialux	6	6
9		Моделирование шумовой обстановки в производственном помещении	3	3
<b>ИТОГО:</b>			<b>51</b>	<b>51</b>

## 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

### 5.1. Перечень контрольных вопросов (типовых заданий)

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание вопросов (типовых заданий)
1	Введение в дисциплину. Основные понятия.	Математические модели и их классификация
2		Вычислительный эксперимент как основа компьютерного моделирования.
3		Физико-химические модели структуры нанобъектов.
4		Классификация методов моделирования строения молекул, супрамолекулярных систем, кластеров, полимеров, кристаллов, наноструктур.
5	Теоретические основы математического и компьютерного моделирования	Краевые задачи математической физики как математическая основа компьютерного моделирования
6		Понятие о численных методах решения краевых задач
7		Понятие о методе Монте-Карло
8		Основные типы физико-математических задач моделирования технологических процессов
9		Современное состояние теоретических подходов к моделированию наноразмерных систем.
10		Использование структурных, спектроскопических и термодинамических данных для построения начальных моделей
11		Моделирование межчастичного взаимодействия
12	Стандартные методы моделирования физических, химических и биологических процессов в наносистемах	Стандартные методы моделирования физических, химических и биологических процессов в наносистемах
13		Квантово-химическое описание химических реакций

14	биологических процессов в наносистемах.	Методы описания химических реакций.	
15		Взаимодействие атомов и молекул с поверхностью.	
16		Моделирование периодических атомных и молекулярных систем	
17		Приближение локальной плотности. Уровень Ферми. Плотность состояний	
18		Зонная структура и свойства твердых тел. Кластерное приближение.	
19		Электронное строение периодических наноструктур.	
20		Термодинамика поверхности и границ раздела	
21		Моделирование Тонкие пленки и покрытия.	
22		Моделирование полупроводниковых и диэлектрических наноматериалов	
23		Моделирование безопасной производственной среды в нанотехнологиях	Моделирование системы освещения производственного помещения
24			Моделирование шумовой обстановки

## **5.2. Перечень тем курсовых проектов, курсовых работ, их краткое содержание и объем**

Учебным планом предусмотрено выполнение курсовой работы по дисциплине на тему: «Моделирование свойств нанодисперсных функциональных объектов и изделий на их основе»

Целью курсовой работы является закрепление студентом учебного материала по дисциплине и навыков самостоятельного выбора, расчета и моделирования свойств объектов в наноразмерном состоянии, а также моделирование безопасной производственной среды при производстве и эксплуатации данных объектов.

Пояснительная записка к курсовому проекту должна включать титульный лист, задание на курсовую работу, содержание, введение, характеристику исследуемых объектов, анализ вредных и/или опасных производственных факторов, характерных для данного технологического процесса, моделирование электрофизических, механических, термодинамических свойств и процессов исследуемых объектов наноразмерного уровня, моделирование безопасной производственной среды; выводы по работе, список используемой литературы. Объем курсового проекта должен составлять не менее 30 страниц печатного текста с расчетами.

Для разработки студентам предлагается индивидуальные темы и задания. Каждое задание включает в себя характеристику предлагаемого для анализа объекта (вещества в ультрадисперсном и наноразмерном состоянии, тонкие пленки, нанопокрывтия и т.д.) с исходными данными, необходимыми для расчетов (например, химическое строение, основные свойства) Студенту необходимо проанализировать исходные данные к заданию, самостоятельно сделать обоснованный выбор метода и провести моделирование заданных процессов или свойств объекта (диффузия, тепло-массоперенос, движение заряженных частиц и др.) соответствии с методиками, имеющимися в справочной, научно-технической

или нормативной литературе.

### **5.3. Перечень индивидуальных домашних заданий, расчетно-графических заданий**

Учебным планом не предусмотрено.

## **6. ОСНОВНАЯ И ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА**

### **6.1. Перечень основной литературы**

1. Заводинский В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем [Электронный ресурс]/ Заводинский В.Г.— Электрон. текстовые данные.— М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013.— 176 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/24421>.— ЭБС «IPRbooks», по паролю
2. Суздалев И. П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов - М.: КомКнига, 2006. - 590 с.
3. Пул Ч. Нанотехнологии. Учеб. пособие / Пул, Ч., Оуэнс, Ф. - М.: Техносфера, 2006. – 334 с.
4. Рыжонков Д. И. Наноматериалы: учеб. пособие / Д. И. Рыжонков, В. В. Левина, Э. Л. Дзидзигури. - 2-е изд. - М.: Бинوم. Лаборатория Знаний, 2010. - 365 с.
5. Рит М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета [Электронный ресурс]/ Рит М.— Электрон. текстовые данные.— Москва, Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2005.— 160 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/16574>.— ЭБС «IPRbooks», по паролю
6. Наноструктурные материалы [Электронный ресурс]: учебное пособие/ — Электрон. текстовые данные.— М.: Техносфера, 2009.— 488 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/12730>.— ЭБС «IPRbooks», по паролю

### **6.2. Перечень дополнительной литературы**

1. Минько Н.И. Методы получения и свойства нанообъектов [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Н. И. Минько [и др.]. – Электрон. текстовые дан. – Белгород : Изд-во БГТУ им. В. Г. Шухова, 2007.- 148 с.
2. Дьячков, П. Н. Углеродные нанотрубки. Строение, свойства, применения / П. Н. Дьячков. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 293 с.
3. Шабанова, Н. А. Химия и технология нанодисперсных оксидов : учеб. пособие / Н. А. Шабанова, В. В. Попов, П. Д. Саркисов. – М.: Академкнига, 2007. – 309 с.



### 6.3. Перечень интернет ресурсов

1. Электронный фонд правовой и научно-технической информации  
<http://docs.cntd.ru/>
2. Информационно-правовой портал Гарант.ру <http://www.garant.ru/>
3. Информационно-правовой портал Консультант плюс  
<http://www.consultant.ru/>
4. Министерство труда и социальной защиты РФ  
<http://www.rosmintrud.ru/>

## 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Материально-техническое обеспечение дисциплины осуществляется выпускающей кафедрой «Безопасность жизнедеятельности». Так, учебно-исследовательская лаборатория «Промышленная безопасность» оснащена необходимым оборудованием для проведения лабораторных, научно-исследовательских работ. Имеется Измеритель вибрации ИВ4-02, весы аналитические: ВАР-200, ВЭЛ-200 и др., установка «Звукоизоляция и звукопоглощение» БЖ2м, Генератор сигналов ФГ-100 Лабораторная установка «Защита от СВЧ-излучения». Комплект типового лабораторного оборудования "Основы метрологии и электрические измерения" ОМ-ЭИ-ПО. Для занятий имеются прикладные программные комплексы: «MathCad», «Mathlab», «Comsol Multiphysics», «Autodesk Ecotect», «Dialux», «Сталкер» v. 4.11, «ПК Шум» v. 4.03, «ЭкоРасчет» v. 4.06, «Призма» v.4.30, «Light-in-Night Road» v. 4.0, «GreenLine» v.2.6.3.4., «SigmaPlot» v.8.0, «Bio-Rad Laboratories», v. 5.1, «EPR» v. 4.0 «OPUS» v. 5.5 Demo.

Для защиты научных докладов в виде презентации на кафедре «Безопасность жизнедеятельности» предусмотрены аудитории, оснащенные компьютерными проекторами в комплекте с ноутбуком и экраном с соответствующим демонстрационным материалом.

## 8. УТВЕРЖДЕНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Утверждение рабочей программы без изменений  
Рабочая программа без изменений утверждена на 2017/2018 учебный год.  
Протокол № 15 заседания кафедры от « 26 » 06 2017 г.

Заведующий кафедрой



Лопанов А.Н.

Директор института



Павленко В.И.

## 8. УТВЕРЖДЕНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Утверждение рабочей программы без изменений  
Рабочая программа без изменений утверждена на 2018 /2019 учебный год.  
Протокол № 13 заседания кафедры от «28» мая 2018 г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  \_\_\_\_\_ Лопанов А.Н.  
подпись, ФИО

Директор института \_\_\_\_\_  \_\_\_\_\_ Павленко В.И.  
подпись, ФИО

## 8. УТВЕРЖДЕНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Утверждение рабочей программы без изменений  
Рабочая программа без изменений утверждена на **2019/2020** учебный  
год.

Протокол № 14 заседания кафедры от « 14 » 06 2019 г.

Заведующий кафедрой  Лопанов А.Н.  
подпись, ФИО

Директор института  Павленко В.И.  
подпись, ФИО

## 8. УТВЕРЖДЕНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Утверждение рабочей программы без изменений


Рабочая программа без изменений утверждена на 20<sup>21</sup>/20<sup>22</sup> учебный год.  
Протокол № 6/1 заседания кафедры от «14» 05 20<sup>20</sup> г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

  
подпись, ФИО

Соловьев И.И.

Директор института \_\_\_\_\_

  
подпись, ФИО

## 8. УТВЕРЖДЕНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Рабочая программа утверждена на 20 21 / 20 22 учебный год  
без изменений

Протокол № 7 заседания кафедры от «14» 05 20 21 г.

Заведующий кафедрой  Лопанов Н.Н.  
подпись, ФИО

Директор института  Федорovich Р.Н.  
подпись, ФИО

## ПРИЛОЖЕНИЕ №1

### Методические указания для обучающегося по освоению дисциплины

Дисциплина «Компьютерное моделирование систем и технологий в наноинженерии» входит в блок общепрофессиональных дисциплин учебного плана подготовки бакалавров по направлению 28.03.02 – Наноинженерия профиля «Безопасность систем и технологий наноинженерии».

Дисциплина базируется на знании математических и естественных наук: математики, физики, химии, экологии, а также профессиональных дисциплин: безопасности технологических процессов и производств, производственной безопасности в наноинженерии, безопасности жизнедеятельности, производственной санитарии и гигиены труда.

Целью изучения курса является формирование у студентов теоретических знаний о расчете и проектировании систем защиты работающих от опасных и/или вредных производственных факторов.

Целесообразно изучать данную дисциплину последовательно, опираясь на предыдущий материал.

Обучение проводится в виде лекций и практических занятий, важное значение для изучения курса имеет самостоятельная работа студентов.

Формы контроля знаний студентов предполагают текущий и итоговый контроль. Текущий контроль знаний проводится в форме систематических опросов, периодического тестирования, решений задач по моделированию свойств функциональных объектов наноразмерного уровня. Формой итогового контроля является экзамен.

Распределение материала дисциплины по темам и требования к её освоению содержатся в Рабочей программе дисциплины, которая определяет содержание и особенности изучения курса. Перед итоговым контролем необходимо провести консультации, в том числе, в зависимости от подготовки студентов и индивидуальные.

Самостоятельная работа является главным условием успешного освоения изучаемой учебной дисциплины и формирования высокого профессионализма будущих бакалавров.

Исходный этап изучения курса «Компьютерное моделирование систем и технологий в наноинженерии» предполагает ознакомление с Рабочей программой, характеризующей границы и содержание учебного материала, который подлежит освоению.

Изучение отдельных тем курса необходимо осуществлять в соответствии с поставленными в них целями, их значимостью, основываясь на содержании и вопросах, поставленных в лекции преподавателя и приведенных в планах и заданиях к практическим занятиям.

В учебниках и учебном пособии, представленных в списке рекомендуемой литературы, содержатся возможные ответы на поставленные вопросы. Инструментами освоения учебного материала являются основные *термины и понятия*, составляющие категориальный аппарат дисциплины. Их осмысление,

запоминание и практическое использование являются обязательным условием овладения курсом «Компьютерное моделирование систем и технологий в нанотехнологиях».

Изучая дисциплину, студент должен руководствоваться рекомендациями ведущего преподавателя, так как полученные при освоении дисциплины знания являются базовыми и должны быть использованы для выполнения курсовой работы по дисциплине «Компьютерное моделирование систем и технологий в нанотехнологиях».

На практических занятиях рассматриваются основы моделирования различных свойств и процессов в нанобъектах с использованием распространенных программных комплексов MathCad и MathLab.

При освоении дисциплины студент должен обратить внимание на контрольные вопросы и тесты к разделам учебного пособия, дать на них ответы. Следует внимательно изучать материалы пособия; в случае затруднения повторить материал. Для изучения разделов дисциплины целесообразно использовать рекомендуемую преподавателем учебную литературу, учебное пособие, отражающие содержание курса.

Для самостоятельной подготовки студентам необходимо пользоваться актуальной нормативной и правовой информацией с учетом последних изменений в законодательстве РФ.