

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор
по учебной работе

_____ Э.Ю. Майкова
« ____ » _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины обязательной части
Блока 1 «Дисциплины (модули)»

«Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Направленность (профиль) – Химия функциональных наноматериалов

Тип задач профессиональной деятельности – научно-исследовательский

Форма обучения – очная

Химико-технологический факультет
Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Тверь 20__

Рабочая программа дисциплины соответствует ОХОП подготовки магистров в части требований к результатам обучения по дисциплине и учебному плану.

Разработчик программы:
профессор кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры БХС
« ____ » _____ 20 __ г., протокол № ____.

Заведующий кафедрой

М.Г. Сульман

Согласовано:
Начальник учебно-методического
отдела УМУ

Д.А.Барчуков

Начальник отдела
комплектования
зональной научной библиотеки

О.Ф. Жмыхова

1. Цель и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины «Компьютерные методы моделирования наноструктур» является формирование у студентов знаний и навыков в области компьютерного моделирования химических объектов.

Задачами дисциплины являются:

- формирование представления о математическом и компьютерном моделировании, алгоритмизации и программировании, об основах компьютерного моделирования химических объектов;
- формирование способности использования методов компьютерного моделирования, планирования и организации экспериментов для решения научных задач в области химии и химической технологии;
- формирование навыков компьютерного моделирования и алгоритмизации при решении научных задач в области химии и химической технологии; алгоритмизации и оптимизации экспериментов, обработки экспериментальных данных.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к дисциплине, обязательной части Блока 1 ОП ВО. Для изучения курса требуются знания, умения и навыки, полученные в процессе изучения дисциплин: «Информатика», «Математика», «Информационные технологии в науке и производстве».

Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем для выполнения научно-исследовательской работы, написании статей и тезисов, при подготовке выпускной квалификационной работы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1 Планируемые результаты обучения по дисциплине

Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:

ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИОПК-1.3. *Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

З1.1. Современные программные средства для теоретических и экспериментальных исследований в области химии и наноструктур.

Уметь:

У1.1. Использовать современные программные средства для анализа и обработки данных при исследовании наноструктур.

Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:

ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИОПК-3.1. *Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

32.1. Основные программные средства, используемые в теоретических и экспериментальных исследованиях.

Уметь:

У2.1. Проводить сбор и анализ информации в области химии наноматериалов с использованием современных программных средств.

ИОПК-3.2. *Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

33.1. Основные программные средства, используемые в моделировании наноструктур.

Уметь:

У3.1. Использовать современные программные средства для моделирования наноструктур.

ИОПК-3.3. *Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

34.1. Основы современных вычислительных методов и методы математического моделирования химических структур.

Уметь:

У4.1. Использовать современные программные средства для моделирования свойств веществ и процессов с их участием.

3.2. Технологии, обеспечивающие формирование компетенций

Проведение лекционных занятий; выполнение лабораторных работ; самостоятельная работа под руководством преподавателя.

4. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы

Таблица 1. Распределение трудоемкости дисциплины по видам учебной работы

Вид учебной работы	Зачетные единицы	Академические часы
Общая трудоемкость дисциплины	3	1108
Аудиторные занятия (всего)		39
В том числе:		
Лекции		13
Практические занятия (ПЗ)		не предусмотрены
Лабораторные работы (ЛР)		26
Самостоятельная работа обучающихся (всего)		69
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к лабораторным занятиям		49
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (зачет)		20
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен)		не предусмотрен
Практическая подготовка при реализации дисциплины (всего)		0

5. Структура и содержание дисциплины

5.1. Структура дисциплины

Таблица 2. Модули дисциплины, трудоемкость в часах и виды учебной работы

№	Наименование модуля	Труд-ть часы	Лекции	Практич. занятия	Лаб. практикум	Сам. работа
1	Введение. Тенденции развития вычислительной техники	9	1	-	-	8
2	Основы математического моделирования	16	2	-	4	10
3	Основы алгоритмизации и программирования	16	2	-	4	10
4	Методы оптимизации	16	2	-	5	9
5	Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований	10	1	-	-	9
6	Компьютерное планирование. Формально-логические и эмпирические методы планирования	16	1	-	6	9
7	Математическое и компьютерное моделирование наноструктур	28	4	-	10	14
Всего на дисциплину		108	13	-	26	69

5.2. Содержание дисциплины

МОДУЛЬ 1 «ВВЕДЕНИЕ. ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ»

Тенденции развития вычислительной техники и ее применения для физико-химических исследований. Понятие модели и моделирования. Роль моделирования в физико-химических исследованиях. Особенности применения математических методов и моделей в теории и практике.

МОДУЛЬ 2 «ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ»

Интерполяция и аппроксимация функциональных зависимостей. Способы сглаживания экспериментальных данных. Основные алгоритмы численного интегрирования. Численное дифференцирование, его связь с интерполяцией и аппроксимацией функций. Поиск минимума и максимума функции одной переменной. Поиск минимума и максимума функции многих переменных. Методы решения систем линейных уравнений. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений и систем уравнений.

Основы математического моделирования. Понятие модели. Классификация математических моделей. Виды моделирования. Основные этапы

математического моделирования. Создание математической модели. Реализация математической модели. Тестирование и отладка математической модели. Погрешности математического моделирования. Неустраняемая погрешность (погрешность модели) и устранимая погрешность (погрешность численного метода и погрешность вычислительная).

МОДУЛЬ 3 «ОСНОВЫ АЛГОРИТМИЗАЦИИ И ПРОГРАММИРОВАНИЯ»

Особенности выполнения вычислений на ЭВМ. Диапазон и точность представления чисел. Машинный нуль. Ошибки округления. Абсолютная и относительная погрешность результатов основных математических операций.

Алгоритмы и блок-схемы алгоритмов. Основные свойства и формы представления алгоритмов. Устойчивость вычислительных алгоритмов.

Структура программы: раздел описания и раздел операторов. Логические выражения. Типы величин. Константы и переменные. Массивы переменных. Стандартные математические функции. Программная реализация алгоритмов.

МОДУЛЬ 4 «МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ»

Постановка задачи и понятие оптимизационной модели. Структура оптимизационной модели (целевая функция, система ограничений, условия неотрицательности переменных). Линейные статистические модели и линейное программирование. Формулировка задач и их графическое решение. Алгебраический метод решения оптимизационных задач и симплекс-метод. Базисное решение. Условие оптимизации. Прикладные программы для решения задач методами линейного программирования.

Необходимые и достаточные условия существования экстремума. Классические методы оптимизации. Метод Гаусса-Зейделя. Симплексный метод. Градиентные методы оптимизации. Метод неопределенных множителей Лагранжа.

МОДУЛЬ 5 «ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ»

Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований. Экспертные системы, фреймы и семантические сети.

МОДУЛЬ 6 «КОМПЬЮТЕРНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ. ФОРМАЛЬНО-ЛОГИЧЕСКИЕ И ЭМПИРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ПЛАНИРОВАНИЯ»

Компьютерное планирование органического синтеза. Формально-логические и эмпирические методы планирования. Синтетический и ретросинтетический подходы.

Исследование механизмов протекания реакции: понятия о кинетических расчетах, планирование кинетических экспериментов, обратная задача химической кинетики (виды параметрической идентификации в зависимости от имеющихся представлений), метод решения обратной задачи химической кинетики (построение целевых функций)

МОДУЛЬ 7 «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР»

Общие принципы дизайна (разработки) катализаторов. Примеры разработки катализаторов (метанирования, селективного гидрирования, риформинга, селективного и полного окисления и т.п. – классические подходы). Молекулярное распознавание (Считывание информации, Молекулярные рецепторы, Матричный синтез, Супрамолекулярный катализ, Комплементарность активного центра и субстрата). Эффекты сближение химических объектов, групп.

Изучение термодинамических параметров химических соединений: концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул; метод молекулярной динамики (общие принципы); метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов; метод Монте-Карло, квантовые методы исследования.

Методы корреляции, основанные на теории распознавания образов, регрессионных зависимостях и квантовых моделях молекул.

Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры; линейные формулы Висвиссера, кодирование в системе VIBIGON; таблицы смежности и матрицы связности.

5.3. Лабораторные работы

Таблица 3. Лабораторные работы и их трудоемкость

Порядковый номер модуля. Цели лабораторных работ	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость в часах
Модуль 2 Цель: формирование представлений о математических моделях	Принципы математического моделирования.	4
Модуль 3 Цель: формирование представлений об основах алгоритмизации и программирования.	1) Алгоритмы и блок-схемы алгоритмов. 2) Основные свойства и формы представления алгоритмов. 3) Программная реализация алгоритмов.	4
Модуль 4 Цель: формирование представлений о принципах оптимизации	Методы оптимизации	2
Модуль 6 Цель: формирование навыков планирования эксперимента	1) Компьютерное планирование органического синтеза. 2) Формально-логические и эмпирические методы планирования 3) Построение деревьев синтеза веществ с применением синтетического подхода. 4) Изучение формально-логического подхода компьютерного планирования	6
Модуль 7 Цель: формирование представлений о принципах построения моделей наноструктур	Математические методы моделирования и исследования строения и свойств наноструктур на примере программ молекулярного моделирования	10

5.4. Практические занятия

Учебным планом практические занятия не предусмотрены.

6. Самостоятельная работа обучающихся и текущий контроль успеваемости

6.1. Цели самостоятельной работы

Основными целями самостоятельной работы магистрантов является формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых, рациональных и неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

6.2. Организация и содержание самостоятельной работы

Самостоятельная работа заключается в изучении отдельных тем курса по заданию преподавателя по рекомендуемой им учебной литературе, в подготовке к лабораторным занятиям, к текущему контролю успеваемости; подготовке к зачету.

После вводных лекций, в которых обозначается содержание дисциплины, ее проблематика и практическая значимость, студентам выдаются задания на лабораторные занятия. Студенты выполняют задания в часы СРС в течение семестра в соответствии с освоением учебных разделов. Защита выполненных заданий производится поэтапно в часы лабораторных занятий. Оценивание осуществляется путем устного опроса проводится по содержанию и качеству выполненного задания.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

7.1. Основная литература по дисциплине

1. Введение в нанотехнологию : учебник для вузов по направлению 211000 - "Конструирование и технология электронных средств" / В.И. Марголин [и др.]. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-8114-1318-8. - URL: <https://e.lanbook.com/book/211034>. - (ID=111363-0)

2. Мартин-Пальма, Р. Нанотехнологии: ударный вводный курс : учеб. пособие / Р. Мартин-Пальма, А. Лахтакия; пер. с англ.: Е.Г. Заболоцкого, А.В. Заболоцкого. - Долгопрудный : Интеллект, 2014. - 206 с. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-91559-146-1 : 1012 р. - (ID=105397-4)

3. Соловьев, М.Е. Компьютерная химия : в составе учебно-методического комплекса / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. - Москва : Солон - Пресс, 2005. - 535 с. : ил. - (Библиотека студента) (УМК-У). - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-98003-188-X : 274 р. 94 к. - (ID=59885-10)

7.2. Дополнительная литература по дисциплине

1. Старостин, В.В. Материалы и методы нанотехнологий : учебное пособие для вузов по напр. "Нанотехнологии" : в составе учебно-методического комплекса / В.В. Старостин. - 2-е изд. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 431 с. - (Нанотехнологии) (УМК-У). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-9963-0346-5 : 242 p. - (ID=78276-10)

2. Миттова, И.Я. Наноматериалы: синтез нанокристаллических порошков и получение компактных нанокристаллических материалов : учеб. пособие / И.Я. Миттова, Е.В. Томина, С.С. Лаврушина; Воронежский гос. ун-т. - Воронеж : Воронежский гос. ун-т, 2007. - Внешний сервер. - Текст : электронный. - URL: http://window.edu.ru/window/library?p_mode=1&p_rid=59578&p_rubr=2.2.75.25 . - (ID=78804-0)

3. Суздаев, И.П. Нанотехнология : физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов : в составе учебно-методического комплекса / И.П. Суздаев. - Москва : КомКнига, 2006. - 590 с. : ил. - (Синергетика: от прошлого к будущему) (УМК-У). - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-484-00243-5 : 200 p. - (ID=59120-4)

4. Косивцов, Ю.Ю. Применение ЭВМ в химии, химической технологии и биотехнологии : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / Ю.Ю. Косивцов, А.И. Сидоров, В.В. Алферов; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2005. - 142 с. : ил. - (УМК-У). - Библиогр. : с. 142. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-7995-0313-9 : [б. ц.]. - (ID=59422-107)

5. Манаенков, О.В. Моделирование структур химических соединений с помощью пакетов программ ACD/Chemsketch, Chemoffice, Hyperchem : учеб. пособие для студентов направлений подготовки 240100 Хим. технология, 020100 Химия, 240700 Биотехнология и спец. 020201 Фундамент. и прикл. химия / О.В. Манаенков, Ю.Ю. Косивцов, Э.М. Сульман; Тверской гос. техн. ун-т. - 1-е изд. - Тверь : ТвГТУ, 2013. - Сервер. - Текст : электронный. - ISBN 978-5-7995-0681-0 : 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/99468> . - (ID=99468-1)

6. Молекулярное моделирование: теория и практика : в составе учебно-методического комплекса / Х.Д. Хельтье [и др.]. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 318 с. : ил. - (Медицинская химия) (УМК-У). - Библиогр. : с. 310 - 312. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-9963-0156-0 : 443 p. 52 к. - (ID=81207-18)

7. Гартман, Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов : учеб. пособие / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин. - Москва : Академкнига, 2006. - 416 с. : ил. - (Учебное пособие для вузов). - Библиогр. : с. 413 - 415. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-94628-268-9 : 323 p. - (ID=60797-10)

7.3. Методические материалы

1. Компьютерное моделирование лекарственных препаратов. Работа с комплексным программным пакетом ACD/ChemSketch 5.11 : учеб.-метод. пособие по спец. 020101 "Химия" : в составе учебно-методического комплекса /

сост. О.В. Манаенков ; Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ. - Тверь : ТвГТУ, 2010. - 18 с. - (УМК-М). - CD. - Сервер. - Текст : непосредственный. - Текст : электронный. - [б. ц.]. - (ID=82393-3)

7.4. Программное обеспечение по дисциплине

Операционная система Microsoft Windows: лицензии № ICM-176609 и № ICM-176613 (Azure Dev Tools for Teaching).

Microsoft Office 2007 Russian Academic: OPEN No Level: лицензия № 41902814.

Avogadro 1.0.1 (Freeware version) - 3D визуализация.

ACD ChemSketch 10 (Freeware version).

SpinWorks 2.53.

Model ChemLab 2.6.2.

3D Angles 3.0.

ArgusLab 4.0.1 (Freeware version).

"Кристаллограф" – обучающая программа для компьютерного моделирования кристаллических решеток и многогранников.

7.5. Специализированные базы данных, справочные системы, электронно-библиотечные системы, профессиональные порталы в Интернет

ЭБС и лицензионные ресурсы ТвГТУ размещены:

1. Ресурсы: <https://lib.tstu.tver.ru/header/obr-res>
2. ЭК ТвГТУ: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/Web>
3. ЭБС "Лань": <https://e.lanbook.com/>
4. ЭБС "Университетская библиотека онлайн": <https://www.biblioclub.ru/>
5. ЭБС «IPRBooks»: <https://www.iprbookshop.ru/>
6. Электронная образовательная платформа "Юрайт" (ЭБС «Юрайт»): <https://urait.ru/>
7. Научная электронная библиотека eLIBRARY: <https://elibrary.ru/>
8. Информационная система "ТЕХНОРМАТИВ". Конфигурация "МАКСИМУМ": сетевая версия (годовое обновление): [нормативно-технические, нормативно-правовые и руководящие документы (ГОСТы, РД, СНИПы и др.]. Диск 1, 2, 3, 4. - М.:Технорматив, 2014. - (Документация для профессионалов). - CD. - Текст: электронный. - 119600 р. – (105501-1)
9. База данных учебно-методических комплексов: <https://lib.tstu.tver.ru/header/umk.html>

УМК размещен: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/121534>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины «Компьютерные методы моделирования наноструктур» используются современные средства обучения, возможна демонстрация лекционного материала с помощью проектора. Аудитория для проведения лекционных занятий, проведения защит и презентаций курсовых работ оснащена современной компьютерной и офисной техникой, необходимым

программным обеспечением, электронными учебными пособиями и законодательно-правовой поисковой системой, имеющий выход в глобальную сеть.

Для проведения лабораторных работ имеются лаборатории с персональными компьютерами (наличие локальной вычислительной сети необязательно).

9. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

9.1. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме экзамена

Учебным планом экзамен по дисциплине не предусмотрен.

9.2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме зачета

1. Вид промежуточной аттестации в форме зачета.

Вид промежуточной аттестации устанавливается преподавателем:

по результатам текущего контроля знаний и умений обучающегося без дополнительных контрольных испытаний;

по результатам выполнения дополнительного итогового контрольного испытания при наличии у студентов задолженностей по текущему контролю.

2. При промежуточной аттестации без выполнения дополнительного итогового контрольного испытания студенту в обязательном порядке описываются критерии проставления зачёта:

«зачтено» - выставляется обучающемуся при условии выполнения им всех контрольных мероприятий: посещение лекций в объеме не менее 80% контактной работы с преподавателем, выполнения и защиты заданий на практических занятиях.

При промежуточной аттестации с выполнением заданий дополнительного итогового контрольного испытания студенту выдается билет с вопросами и задачами.

Число заданий для дополнительного итогового контрольного испытания - 15.

Число вопросов – 3 (2 вопроса для категории «знать» и 1 вопрос для категории «уметь»).

Продолжительность – 60 минут.

3. Шкала оценивания промежуточной аттестации – «зачтено», «не зачтено».

4. Критерии выполнения контрольного испытания и условия проставления зачёта:

для категории «знать» (бинарный критерий):

ниже базового - 0 балл;

базовый уровень – 1 балла;

критерии оценки и ее значение для категории «уметь» (бинарный критерий):

отсутствие умения – 0 балл;

наличие умения – 1 балла.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

5. Для дополнительного итогового контрольного испытания студенту в обязательном порядке предоставляется:

база заданий, предназначенных для предъявления обучающемуся на дополнительном итоговом контрольном испытании (типовой образец задания приведен в Приложении);

методические материалы, определяющие процедуру проведения дополнительного итогового испытания и проставления зачёта.

6. Задание выполняется письменно и с использованием ЭВМ. При ответе на вопросы зачета допускается использование справочного материала и непрограммируемого калькулятора при решении задач.

7. База заданий, предъявляемая обучающимся на зачете:

1. Понятие модели и моделирования. Роль моделирования в физико-химических исследованиях.

2. Понятие модели. Классификация математических моделей.

3. Численное дифференцирование, его связь с интерполяцией и аппроксимацией функций.

4. Линейные статистические модели и линейное программирование.

5. Особенности применения математических методов и моделей в теории и практике.

6. Тестирование и отладка математической модели. Погрешности математического моделирования.

7. Алгоритмы и блок-схемы алгоритмов. Основные свойства и формы представления алгоритмов. Устойчивость вычислительных алгоритмов.

8. Константы и переменные. Массивы переменных. Стандартные математические функции. Программная реализация алгоритмов.

9. Структура программы: раздел описания и раздел операторов. Логические выражения.

10. Прикладные программы для решения задач методами линейного программирования.

11. Понятие о планировании экспериментов. Постановочные и дискриминирующие эксперименты.

12. Классические методы оптимизации. Метод Гаусса-Зейделя. Симплексный метод.

13. Градиентные методы оптимизации. Метод неопределенных множителей Лагранжа.

14. Структура оптимизационной модели (целевая функция, система ограничений, условия неотрицательности переменных).

15. Понятие о планировании экспериментов. Постановочные и дискриминирующие эксперименты.

16. Компьютерное планирование органического синтеза. Формально-логические и эмпирические методы планирования.
17. Синтетический и ретросинтетический подходы.
18. Общие принципы кодирования химических соединений.
19. Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований.
20. Молекулярное распознавание (Считывание информации, Молекулярные рецепторы, Матричный синтез, Супрамолекулярный катализ, Комплементарность активного центра и субстрата).
21. Метод молекулярной динамики (общие принципы).
22. Метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов.
23. Общие принципы дизайна (разработки) катализаторов.
24. Изучение термодинамических параметров химических соединений: концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул.
25. Методы корреляции, основанные на теории распознавания образов, регрессионных зависимостях и квантовых моделях молекул.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов задавать студенту в устной форме уточняющие вопросы в рамках задания, выданного студенту.

9.3. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме курсового проекта или курсовой работы

Учебным планом не предусмотрены.

10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Студенты перед началом изучения дисциплины ознакомлены с системами кредитных единиц и балльно-рейтинговой оценки.

Студенты, изучающие дисциплину, обеспечиваются электронными изданиями или доступом к ним, учебно-методическим комплексом по дисциплине, включая методические указания к выполнению практических работ, всех видов самостоятельной работы.

В учебный процесс рекомендуется внедрение субъект-субъектной педагогической технологии, при которой в расписании каждого преподавателя определяется время консультаций студентов по закрепленному за ним модулю дисциплины.

11. Внесение изменений и дополнений в рабочую программу дисциплины

Содержание рабочих программ дисциплин ежегодно обновляется протоколами заседаний кафедры по утвержденной «Положением о структуре, содержании и оформлении рабочих программ дисциплин по образовательным программам, соответствующим ФГОС ВО с учетом профессиональных стандартов» форме.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия
Профиль – Химия функциональных наноматериалов
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации
Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»
Семестр 3

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО
ИСПЫТАНИЯ № 1**

1. Задание для проверки уровня «знать» – 0 или 1 балл:
Понятие модели и моделирования. Роль моделирования в физико-химических исследованиях.

2. Задание для проверки уровня «знать» – 0 или 1 балл:
Сравнить существующие экспертные системы в области физико-химической идентификации веществ.

3. Задание для проверки уровня «уметь» – 0 или 1 балл:
При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними

$$U(r, \text{нм}) = -\frac{2,6 \cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4,4 \cdot 10^{-5}}{r^8} \text{ (эВ)}$$

Сколько парных взаимодействий между атомами можно выделить в кластере из пяти атомов? Рассчитайте энергии кластеров (квадратная пирамида).

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман