

ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный  
исследовательский университет)

Кафедра Пищевые и биотехнологии

**МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ**  
**ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ**  
**ПО ДИСЦИПЛИНЕ**  
**МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРО- И НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ**  
**МАТЕРИАЛОВ**

Разработчик: доцент кафедры пищевые и биотехнологии Меренкова С.П.

Челябинск, 2021

## **1. Цели и задачи дисциплины**

Цель дисциплины "Моделирование микро- и наноструктурированных материалов" – изучение теоретических основ и направлений научных достижений в области моделирования микро- и наноструктурирования материалов.

### **Задачи курса заключаются:**

В изучении теоретических основ и научных достижений в области моделирования микро- и наноструктурирования материалов;

В освоении современных программных продуктов и баз данных, используемых для технологий молекулярного моделирования;

В формировании навыков анализа поставленных задач, разработки технологий на основе использования методов молекулярного моделирования материалов; критического анализа адекватности полученных моделей.

### **Краткое содержание дисциплины**

В курсе изучаются следующие разделы: Микроструктуры, нанокластеры и наноматериалы. Современные подходы к классификации наноматериалов. Биобезопасность нано- и микроструктурированных материалов. Электрические и магнитные свойства микроструктурных и наноматериалов. Самосборка и катализ наноструктур. Биологические (природные) наноструктуры. Макромолекулярные и супрамолекулярные наноструктуры. Классификация технологий и нанотехнологий получения микроструктур и наноматериалов. Принципы моделирования при получении нано- и микроструктурированных материалов

## Содержание дисциплины

Дисциплина «**Моделирование микро- и наноструктурированных материалов**» преподается во четвертом семестре, включает 24 часа лекций и 24 часа практических занятий. Промежуточная аттестация – зачет.

Для текущего контроля освоения разделов дисциплины применяются:

- контрольный опрос,
- анализ компетенций в направлении составления аналитического научного отчета по результатам анализа научной и методической литературы.

**Таблица 1– Структура и содержание лекций**

№ лекции	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	Микроструктуры, нанокластеры и наноматериалы. Современные подходы к классификации наноматериалов. Методы получения нанокластеров и наноструктур. Объемные наноструктурированные материалы	2
2	Биобезопасность наноматериалов. Взаимодействие наночастиц с биологическими объектами в окружающей среде. Пути проникновения наночастиц в живой организм. оценки риска воздействия наноматериалов на окружающую среду и человека	2
3	Электрические и магнитные свойства наносистем и наноматериалов. Магнитные свойства поверхности металлов и оксидов металлов. Адсорбция и катализ.	2
4	Самосборка и катализ микро- и наноструктур. Поверхностные эффекты. Процесс самосборки. Монослои и поверхностные эффекты.	2
5	Макромолекулярные и супрамолекулярные наноструктуры. Биополимеры. Белки. ДНК-дублированная нанопроволока. Мицеллы и везикулы.	2
6	Природные нанокристаллы: цеолиты, наноглины, гидроксиапатит, нанокристаллическая целлюлоза. Методы получения, направления использования в промышленности, в биотехнологии, в медицине.	2
7	Классификация технологий и нанотехнологий получения нано- и микроструктурированных материалов. Механические методы получения нанопорошков. Методы физического и химического диспергирования. Пиролиз . Способы консолидации наноразмерных порошков.	2
8	Микро- и наноматериалы в биотехнологии. Нанобиотехнологии на основе белковых молекул: Фуллерены. Углеродные нанотрубки. Наночастицы золота и серебра. Наночастицы диоксида кремния, оксидов цинка и титана. Квантовые точки. Дендримеры. Наноглины. Липосомы, полимерные мицеллы, перфторуглеродные и суперпарамагнитные наночастицы.	2
9	Применение микро и нано структурированных материалов в медицине. Нанобиотехнологии в разработке диагностических устройств. Биосенсоры: основные принципы функционирования. Микроаналитические системы. Чипирование органов. Нанотехнологии в диагностике ряда заболеваний. Современные системы доставки лекарств на основе микро- и наночастиц Нанофармацевтические модели. Тераностика. Липосомы. Полимерные мицеллы. Дендримеры. Квантовые точки. Твердые наночастицы.	4
10	Принципы моделирования при получении нано- и микроструктурированных материалов. Модели в форме обыкновенных дифференциальных уравнений; модели для систем с распределенными параметрами; модели в форме интегральных уравнений. Построение эмпирических моделей на основе аппроксимации данных	4

**Таблица 2– Структура и содержание практических занятий**

№ занятия	Наименование или краткое содержание практического занятия, семинара	Кол-во часов
1	Программное конструирование белковых и нуклеотидных наноструктур. На примере молекул ДНК и белка. Нанотехнологии на основе самосборки молекул ДНК и РНК (методы плиточных конструкций, методы динамической сборки)	4
2	Моделирование технологии получения микрокристаллической целлюлозы методом высокоинтенсивной ультразвуковой обработки.	4
3	Моделирование технологии получения нанопорошков механическими методами: механосинтез; интенсивная пластическая деформация	4
4	Моделирование технологии получения микро- и наноструктурированных материалов методами физического диспергирования: распыление струи расплава жидкостью; спиннигование (запекание из жидкого состояния); метод испарения-конденсации (газофазовый синтез); вакуум-сублимационные технологии; контролируемая кристаллизация из аморфного состояния.	4
5	Моделирование технологий образования нано- или микроэмульсий,. Сравнительный анализ высокоэнергетических методов: гомогенизация высоким давлением и ультразвуковая гомогенизация	4
6	Моделирование состава наноструктур на основе полимера. Способ получения гибридных нанокомпозитов при одновременном формировании органической и неорганической сеток. Формирование неорганического кластера оксида кремния в полимерной матрице полиэфирсульфона и схема возможной гибридной организации неорганического кластера в полимерной сетке.	4

**Самостоятельная работа студента**

1. Изучение учебной и научной литературы, работа с патентной информацией и нормативной документацией.
2. Формирование аналитического научного отчета
3. Подготовка к текущему контрольному опросу, зачету.

## **Перечень вопросов для подготовки к контрольному опросу:**

1. Основные классы наноматериалов и нанотехнологий.
2. Углеродные нанокластеры, наноструктуры и наноматериалы.
3. Объемные наноструктурированные материалы.
4. Электрические и магнитные свойства наносистем и наноматериалов.
5. Механизм самосборки и катализа наноструктур. Поверхностные эффекты.
6. Классификация биологических наноструктур.
7. Методы измерения, исследования и формирования наноструктур.
8. Методы исследований и измерений наноструктур.
9. Применение наноматериалов и нанотехнологий.
10. Оптические волокна с фотонно-кристаллической структурой.
11. Методы морфологического исследования микро- и наноструктур
12. Аналитические методы исследования микро- и наноструктур
13. Препаративные методы исследования микро- и наноструктур
14. Характеристика золь-гель метода получения микро- и наночастиц
15. Характеристика метода синтеза наночастиц в мицеллах
16. Характеристика метода химического диспергирования при получении микро- и наноэмульсий.

## **Рекомендуемое содержание разделов научного отчета:**

1. Введение
  2. Анализ современного состояния и направления развития анализируемой проблемы
  3. Современные методы и инструменты для реализации технологии и оценки ее этапов.
  4. Методы и этапы моделирования технологии получения материалов
- Заключение
- Список литературы

## **Примерный перечень вопросов к зачету:**

17. Современная классификация микроструктурированных материалов
18. Классификация наноструктур по различным признакам.
19. Углеродные нанокластеры, наноструктуры и наноматериалы.
20. Объемные наноструктурированные материалы.
21. Электрические и магнитные свойства наносистем и наноматериалов.
22. Магнитные свойства поверхности металлов и оксидов металлов.
23. Механизм самосборки и катализа наноструктур. Поверхностные эффекты.
24. Классификация биологических наноструктур.
25. Механизмы взаимодействия наночастиц с биологическими объектами в окружающей среде.
26. Риски влияния наноструктур на экосистему
27. Характеристика особенностей целотов, как природных нанокристаллов
28. Характеристика природной наноструктуры - нанокристаллической целлюлозы.
29. Направления использования природных наноструктур: цеолитов, наноглин, НКЦ в промышленности, в биотехнологии, в медицине.

30. . Механизм самосборки молекул ДНК методами плиточных конструкций
31. Методы измерения, исследования и формирования наноструктур.
32. Методы исследований и измерений наноструктур.
33. Применение наноматериалов и нанотехнологий.
34. Методы морфологического исследования микро- и наноструктур
35. Аналитические методы исследования микро- и наноструктур
36. Препаративные методы исследования микро- и наноструктур
37. Методы получения нанокластеров и наноструктур.
38. Характеристика золь-гель метода получения микро- и наночастиц
39. Характеристика метода синтеза наночастиц в мицеллах
40. Характеристика метода химического диспергирования при получении микро- и нано эмульсий.
41. . Механические методы получения нанопорошков.
42. Способы консолидации наноразмерных порошков
43. Применение нанобиотехнологий в разработке диагностических устройств.
44. Основные принципы функционирования биосенсоров
45. Применение наноструктурированных материалов в диагностике ряда заболеваний.
46. Современные системы доставки лекарств на основе микро- и наночастиц  
Нанофармацевтические модели. Липосомы. Полимерные мицеллы.

### **Список рекомендуемой литературы:**

1. Введение в математическое моделирование Учеб. пособие В. Н. Ашихмин, М. Б. Гитман, И. Э. Келлер и др.; Под ред. П. В. Трусова. - М.: Логос, 2004. - 439 с. ил.
2. Кирчанов, В. С. Наноматериалы и нанотехнологии : учебное пособие / В. С. Кирчанов. — Пермь : ПНИПУ, 2016. — 241 с. — URL: <https://e.lanbook.com/book/160880>.
3. Будкевич, Е. В. Биомедицинские нанотехнологии : учебное пособие для вузов / Е. В. Будкевич, Р. О. Будкевич. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 176 с. <https://e.lanbook.com/book/171403> (дата обращения: 12.10.2021).
4. Оглезнева, С. А. Материаловедение и технологии современных и перспективных материалов : учебное пособие / С. А. Оглезнева. — Пермь : ПНИПУ, 2012. — 307 с. <https://e.lanbook.com/book/160557>
5. Оглезнева, С. А. Материаловедение и технологии современных и перспективных материалов : учебное пособие / С. А. Оглезнева. — Пермь : ПНИПУ, 2012. — 307 с. <https://e.lanbook.com/book/160557>
6. Михайлин, Ю. А. Специальные полимерные композиционные материалы / Ю. А. Михайлин. — Санкт-Петербург : НОТ, 2009. — 660 с. <https://e.lanbook.com/book>
7. Рамбиди, Н. Г. Физические и химические основы нанотехнологий : учебное пособие / Н. Г. Рамбиди, А. В. Берёзкин. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 456 с. <https://e.lanbook.com/book/2291>
8. Голубева, Н. В. Математическое моделирование систем и процессов : учебное пособие / Н. В. Голубева. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. <https://e.lanbook.com/book/168961>.

### **Отечественные и зарубежные издания:**

1. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика
2. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Пищевые и биотехнологии
3. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математическое моделирование и программирование
4. Resources Policy
5. Science of The Total Environment
6. Nanomedicine: Nanotechnology, Biology, and Medicine
7. Journal of Nanobiotechnology
8. International Journal of Nanomedicine
9. IET Nanobiotechnology
10. Artificial Cells, Nanomedicine and Biotechnology