

Научная статья
УДК 004.77
ББК 22.18
ГРНТИ 20.53.23
ВАК 1.2.3.
PACS 01.40.Di
OCIS 000.2060
MSC 00A79

Разработка дистанционного курса по моделированию наноматериалов

А. А. Родионова  ¹

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», 432071, Ульяновск, Россия

Поступила в редакцию 12 мая 2025 года
После переработки 15 мая 2025 года
Опубликована 14 июня 2025 года

Аннотация. Представлены результаты разработки дистанционного курса по моделированию наноматериалов в системе управления обучением MOODLE. Описаны результаты разработки структуры дистанционного курса по моделированию наноматериалов, включая теоретические модули, практические задания по компьютерному моделированию.

Ключевые слова: курс, дистанционный курс, система управления обучением, наноматериал, моделирование наноматериалов

Введение

Современные технологии требуют специалистов в области наноматериалов, но традиционные методы обучения не всегда доступны для удалённых студентов. Дистанционные курсы решают эту проблему, обеспечивая гибкость и интерактивность. Данный курс отвечает вызовам цифровизации образования и запросам промышленности на подготовку квалифицированных кадров.

Целью работы является исследование процесса разработки дистанционного курса «Моделирование наноматериалов», направленного на формирование у обучающихся компетенций в области компьютерного моделирования физических процессов в наноматериалах с использованием современных цифровых технологий.

Для достижения указанной цели в работе поставлены следующие задачи исследования:

1. анализ литературы по методам моделирования наноматериалов,
2. разработка структуры курса по моделированию наноматериалов, включая теоретические модули, практические задания по компьютерному моделированию.

¹E-mail: rod_nastay_0000@mail.ru

Объектом исследования является процесс обучения моделированию наноматериалов с применением дистанционных образовательных технологий.

Предметом исследования является система методологических и технологических аспектов разработки дистанционного курса по моделированию наноматериалов.

Методами исследования являются компьютерные методы разработки дистанционных курсов, анализ научной литературы по моделированию наноматериалов. Материалами исследования являются платформа для дистанционного обучения MOODLE, научные публикации по моделированию наноматериалов.

Научная новизна исследования заключается в том, что разработана авторская методика преподавания моделирования наноматериалов в дистанционном формате.

Гипотеза исследования заключается в том, что дистанционный курс по моделированию наноматериалов повысит доступность и качество обучения за счёт применения дистанционных технологий и практико-ориентированных методов обучения моделированию наноматериалов.

Теоретическая значимость исследования заключается в том, что исследование расширяет методологическую базу дистанционного обучения в сфере модулирования физических процессов в наноматериалах, систематизирует подходы к моделированию физических процессов в наноматериалах и предлагает новые принципы организации образовательного процесса. Практическая значимость исследования заключается в том, что дистанционный курс по моделированию наноматериалов может быть использован в вузах и научных центрах для подготовки специалистов в области нанотехнологий.

Технология дистанционного обучения становится всё более популярной и востребованной образовательной технологией в условиях непрерывного развития современных образовательных технологий с учётом возможностей Интернета и видеоконференцсвязи. Технологии дистанционного обучения позволяют успешно использовать их для достижения высоких результатов в изучении компьютерного моделирования наноматериалов.

Базой исследования для создания дистанционного курса по дисциплине «Моделирование наноматериалов» в системе управления обучением MOODLE является образовательный портал ФГБОУ ВО «УлГПУ им. И. Н. Ульянова».

Обзор

Моделирование наноматериалов — это многогранная область, которая объединяет различные вычислительные и имитационные методы для прогнозирования и улучшения свойств и производительности наноматериалов. Наноматериалы на основе углерода, такие как графен и углеродные нанотрубки, требуют индивидуальных подходов к моделированию из-за их сложных механизмов, работающих в различных временных и пространственных масштабах. Эти модели имеют решающее значение для проектирования новых материалов с определёнными функциональными возможностями и постоянно развиваются, чтобы включать в себя новейшие разработки в этой области [1]. В статье [1] рассматриваются различные методы моделирования для наноматериалов на основе углерода и полученных композитов/устройств, подчеркиваются сильные и слабые стороны и области применения, а также демонстрируется потенциал моделирования в адаптации материалов для конкретных функций и систем. В статье [1] рассматриваются различные методы моделирования для наноматериалов на основе углерода, таких как графен и углеродные нанотрубки. В статье [1] подчёркивается, что на характеристики этих материалов влияют механизмы в различных временных и пространственных масштабах, что требует индивидуальных подходов, основанных на типе материала, размере и внутренней структуре. В статье [1] подчёркиваются сильные и слабые стороны различных методов анализа и моделирования, демонстрируются их потенциальные

области применения и текущие достижения в подходах к моделированию для проектирования новых материалов и функций. Вычислительные подходы, включая имитацию и моделирование, всё чаще пользуются предпочтением по сравнению с традиционными экспериментальными методами для понимания изготовления и характеристики наноматериалов. Эти методы позволяют точно предсказывать условия роста и структурный анализ, предоставляя руководство для выбора подходящего программного обеспечения и теорий для проектирования наноматериалов [2]. В работе [2] изучается эффективность вычислительных подходов в прогнозировании условий роста и характеристик наноматериалов, подчёркивая роль моделирования и имитаций в передовых исследованиях и разработках устройств и структур на основе наноматериалов. Моделирование наноматериалов включает использование вычислительных подходов для прогнозирования условий роста и эффективной характеристики структур. В работе [2] подчёркивает важность моделирования для понимания условий и результатов изготовления, предлагая руководство по выбору подходящего программного обеспечения и теорий для проектирования. Этот метод позволяет исследователям систематически оценивать условия процесса перед началом сложных экспериментальных испытаний, тем самым улучшая разработку наноматериалов и устройств на основе наноматериалов. В целом, моделирование играет решающую роль в продвижении исследований в этой области [2]. Моделирование наноматериалов распространяется на различные структуры, включая нанокристаллы и нанотрубки, и имеет важное значение для приложений в нанoeлектронике, где такие материалы, как сегнетоэлектрики и ферромагнетики, моделируются с учётом их динамических свойств [3]. В работе [3] рассматриваются результаты вычислительных подробных исследований (симуляция, моделирование и расчёты) структур, основных свойств и особенностей различных наноматериалов (нанокристаллов, наночастиц, нанослоёв, нановолокон, нанотрубок и т. д.) на основе различных элементов, включая органические и биологические компоненты, такие как аминокислоты и пептиды и т. д. Моделирование наноматериалов включает вычислительные исследования различных наноструктур, таких как нанокристаллы, наночастицы и нанотрубки, с акцентом на их структурах и свойствах. Это включает моделирование динамики и кинетики, особенно для сегнетоэлектриков и ферромагнетиков, которые необходимы для приложений в нанoeлектронике. В работе [3] также делается упор на компьютерное моделирование композитов с полимерными сегнетоэлектриками и графеноподобными структурами, используя такие методы, как теория функционала плотности и молекулярная динамика, для анализа их поведения и характеристик. Машинное обучение стало преобразующим инструментом в проектировании наноматериалов, позволяя проводить предиктивное моделирование, которое ориентируется в обширном пространстве параметров атомного состава и структурной морфологии. Модели машинного обучения, использующие такие методы, как нейронные сети и машины опорных векторов, с высокой точностью предсказывают критические свойства, такие как проводимость и термическая стабильность. Эти модели также включают трансферное обучение для адаптации к новым типам материалов, что снижает вычислительные затраты и ускоряет процесс открытия новых наноматериалов в электронике [4, 5]. В работе [4] машинное обучение используется для разработки предиктивных моделей для проектирования наноматериалов, повышая производительность в электронике за счёт оптимизации свойств материалов и производительности устройств с помощью методологий, управляемых данными, и методов трансферного обучения. Моделирование наноматериалов в работе [4] включает использование методов машинного обучения для прогнозирования свойств материалов и повышения производительности в электронике. В работе [4] используются контролируемые модели обучения, обученные на обширных наборах данных, с упором на ключевые атрибуты, такие как проводимость и термическая стабильность. Благодаря

включению проектирования признаков и трансферного обучения модели эффективно перемещаются по сложному пространству параметров наноматериалов, что приводит к повышению точности и снижению экспериментальной нагрузки. Интеграция машинного обучения в проектирование наноматериалов преобразует электронику, позволяя использовать предиктивное моделирование для улучшения свойств материалов и производительности устройств. Наноматериалы с их уникальными характеристиками и широким применением в полупроводниках, батареях и датчиках являются ключом к следующему поколению электронных достижений. Однако оптимизация свойств наноматериалов требует навигации в обширном пространстве параметров, охватывающем атомный состав, структурную морфологию и функциональные характеристики, с которыми традиционные экспериментальные подходы в одиночку с трудом справляются. Этот подход, управляемый данными, ускоряет цикл проектирования и облегчает открытие новых наноматериалов для электронных приложений.

В статье [6] разработана и реализована интегрированная структура моделирования, имитации и визуализации наноматериалов, а экспериментальные результаты показывают, что предлагаемый подход осуществим и эффективен. Моделирование наноматериалов включает создание параметрических моделей таких материалов, как графен, углеродные нанотрубки и металлоорганические каркасы, для понимания их микроструктуры и макроскопических свойств. В статье [6] представлен интегрированный подход, который объединяет моделирование, имитацию и визуализацию, используя список смежности для эффективного представления структуры и алгоритм разбиения пространства октодерева для быстрой реконструкции. Эта система позволяет интерактивно редактировать модели, сохраняя физическую достоверность, обеспечивая эффективную минимизацию энергии и итеративное моделирование без громоздких преобразований файлов.

В статье [7] разработана онлайн-платформа наноинформатики, которая аннотирует наноструктуры и предоставляет наборы инструментов машинного обучения для моделирования свойств и биоактивности наноматериалов, что позволяет прогнозировать на основе данных и синтезировать новые наноматериалы с улучшенной безопасностью и эффективностью. В статье [7] представлена платформа наноинформатики, которая облегчает моделирование наноматериалов, предоставляя машиночитаемые файлы данных и наборы инструментов моделирования. Она обеспечивает стандартизацию данных, визуализацию и разработку моделей машинного обучения для прогнозирования свойств и биоактивности новых наноматериалов. Платформа аннотировала наноструктуры 14 типов материалов и включает библиотеку виртуальных наноструктур с их прогнозируемыми свойствами, что значительно помогает синтезу и разработке безопасных и эффективных наноматериалов для сообщества наноинформатики [7].

В статье [8] представлены результаты моделирования и имитации наноматериалов, которые дают хорошую подборку потенциальных задач и проблем, которые можно решить с помощью моделирования и имитации. Моделирование наноматериалов включает использование передовых вычислительных методов, таких как моделирование молекулярной динамики и теория функционала плотности, для понимания поведения и свойств материалов в атомном масштабе. Эти методы приобрели популярность благодаря своей способности справляться со сложными системами, раскрывая понимание механической деформации, эволюции дефектов и электронных структур. Недавние исследования объединяют моделирование в атомном масштабе с машинным обучением для улучшения проектирования и открытия материалов, решая проблемы в наноматериалах, где традиционные экспериментальные данные ограничены.

В статье [9] обсуждается создание базы данных наноматериалов, которая облегчает моделирование наноматериалов, предоставляя аннотированные наноструктуры и

физико-химические свойства. Она включает 705 уникальных наноматериалов с шестью свойствами каждый, генерируя 2142 нанодескриптора для приложений машинного обучения. База данных поддерживает исследования моделирования наноинформатики, управляемые данными, позволяя предсказывать моделирование свойств и биоактивности наноматериалов. Этот ресурс направлен на улучшение рационального проектирования наноматериалов и улучшение применения наноматериалов в различных областях, включая доставку лекарств и экологическую безопасность.

В работе [10] показано, что математическое моделирование необходимо для понимания и прогнозирования поведения наносистем и играет решающую роль в проектировании и оптимизации наноустройств и процессов. В работе [11] рассматривается моделирование механических и термических свойств наноматериалов и нанокомпозитов и показано, что добавление наночастиц/композитов в базовый материал может улучшить термические и структурные свойства.

В работе [12] разработана математическая модель материала для наноматериала, используя модель виртуальной внутренней связи для получения различных результатов.

В работе [13] представлен подход к моделированию биологических эффектов наноматериалов на основе интеллектуального анализа данных, который показывает, что различные биологические эффекты имеют разную точность моделирования при использовании одного и того же набора алгоритмов и данных.

В работе [14] сообщается о влиянии молекулярного моделирования на разработку наноматериалов и представляют три тематических исследования для конкретных применений в полимерных нанокompозитах, нанодиэлектриках и литий-ионных аккумуляторах.

В статье [15] представлен и обсуждается ряд недавних вдохновляющих приложений моделирования QSAR и дескрипторов для наноматериалов с акцентом на подходы, которые пытаются описать взаимодействия, происходящие на нанобиоинтерфейсе.

В статье [16] создан новый вычислительный рабочий процесс для виртуального профилирования наночастиц путём создания структурно разнообразной библиотеки виртуальных золотых наночастиц и разработки новых универсальных нанодескрипторов, которые подходят для количественного моделирования виртуальных золотых наночастиц и целей виртуального скрининга.

В работе [17] представлены результаты компьютерного моделирования неорганических наноматериалов, представляющего собой доступное и унифицированное введение в различные методы моделирования неорганических материалов, размеры которых приближаются к наномасштабу.

В работе [18] представлены два различных иерархических подхода к описанию механики наноматериалов, а также систематическое сравнение с точки зрения точности и области применимости. В работе [18] представлены два иерархических подхода к моделированию наноматериалов: модель на основе континуума, полученная из упругости кристалла, и модель виртуального атомного кластера. Эти модели оценивают механику наноматериалов, подчеркивая связи между структурой и свойствами и их связь с атомистическими моделями.

В работе [19] представлено мультифизическое моделирование путей и восстановления наночастиц в окружающей среде, позволяющее оценить распределение наноматериалов в окружающей среде. Математические модели и моделирование помогают понять пути, транспортировку и взаимодействие наноматериалов в окружающей среде и оптимизировать процессы восстановления. Моделирование наноматериалов включает использование математических моделей и мультифизического моделирования для оценки распределения, транспортировки и восстановления наноматериалов в окружа-

ющей среде. Текущие модели включают анализ потока материалов, мультимедийные компартментальные модели и пространственные модели рек и водосборов, решая проблемы восстановления наночастиц.

В работе [20] представлены теоретические основы трёх наиболее широко используемых методов атомистического моделирования: методы первых принципов, сильной связи и молекулярной динамики, а также некоторые подробные демонстрации их применения в моделировании наноматериалов. Моделирование наноматериалов использует вычислительное моделирование, включая методы первых принципов, сильной связи и молекулярной динамики, для исследования взаимосвязей структура-свойство и проектирования искусственных структур. Эти методы дают представление о физических явлениях в наномасштабе, которые сложно измерить экспериментально, улучшая проектирование и применение наноматериалов.

В статье [21] предлагается математическая онтологическая модель области наноматериалов со сложными структурами и терминами из онтологий органической химии и физической химии. В статье [21] предлагается математическая онтологическая модель для наноматериалов, интегрирующая термины из органической и физической химии. Эта модель направлена на улучшение интеллектуальных систем моделирования путём предоставления формального описания наноматериалов, облегчая объединение знаний и данных между дисциплинами.

В работе [22] обсуждается компьютерное моделирование наноструктурированных материалов, а два стандартных метода моделирования систем нанометрового масштаба — молекулярная динамика и моделирование Монте-Карло. Моделирование наноматериалов в первую очередь использует молекулярную динамику и моделирование Монте-Карло для исследования явлений на атомном уровне, прогнозирования новых материалов и анализа механических свойств. Улучшенные подходы к многомасштабному моделированию необходимы для соединения атомного моделирования с макроскопическими измерениями в наноструктурированных материалах.

В статье [23] рассматривается трёхуровневая (микроуровень, мезоуровень, макроуровень) схема моделирования структуры наноматериалов на основе физики квантово-размерных мезочастиц. Моделирование наноматериалов предполагает трёхуровневую схему из микроуровня, мезоуровня, макроуровня на основе квантово-размерных мезочастиц. В статье [23] используется топология квантовой плотности для микроструктуры и динамика теплового поля для макроструктуры, классифицируя физические и химические мезопроцессы через неэквивалентные квантово-размерные преобразования.

В статье [24] разработана модель классификатора опорных векторов с гибридным генетическим алгоритмом (GA-SVMC) для прогнозирования токсичности наноматериалов. Моделирование наноматериалов включает характеристику материалов с использованием таких атрибутов, как размер, площадь поверхности и химический состав. В статье [24] предлагается модель опорных векторов с гибридным генетическим алгоритмом для прогнозирования токсичности наноматериалов, что повышает точность прогнозирования и обобщение в задачах классификации.

В статье [25] была предложена теоретическая модель электронного уровня для выявления физико-химической природы зависящей от размера поверхностной реактивности наноматериалов, показывающая, что конкурентное перераспределение поверхностных атомных орбиталей из расширенных энергетических зонных состояний в локализованные поверхностные химические связи является критическим электронным процессом поверхностных химических взаимодействий, используя хемосорбцию $\text{H}_2\text{O}_2\text{-TiO}_2$ в качестве модельной реакции. В статье [25] предлагается математическая модель, определяющая «орбитальный потенциал» для описания электронных характеристик, влияющих на поверхностную реактивность в наноматериалах. Она исследует, как уменьшение

размера модулирует поверхностную реактивность посредством конкурентного перераспределения поверхностных атомных орбиталей в хемосорбции $\text{H}_2\text{O}_2\text{-TiO}_2$.

В работе [26] обсуждаются основные атомистические методы моделирования, включая молекулярную динамику и методы Монте-Карло, для моделирования взаимодействий между биологическими молекулами и наноматериалами, с упором на межмолекулярные силы и многомасштабное моделирование для улучшения понимания этих сложных физических взаимодействий на различных уровнях. В работе [26] обсуждается разработка и применение атомистических методов моделирования, таких как молекулярная динамика, Монте-Карло и крупнозернистая молекулярная динамика, для изучения взаимодействия биомолекул, таких как аминокислоты, пептиды, белки и нуклеотиды дезоксирибонуклеиновой кислоты, с функциональными наноматериалами на различных длинах и временных масштабах.

Компьютерное моделирование наноматериалов представляет собой высокоточный вычислительный процесс, основанный на методах квантовой механики и квантовой электродинамики (например, методы матрицы плотности или молекулярной динамики), который позволяет предсказывать структуру, свойства и поведение материалов на наноуровне. Используя суперкомпьютеры и алгоритмы машинного обучения, исследователи анализируют атомные взаимодействия, фазовые переходы, механические и электронные характеристики, что ускоряет разработку инновационных наноструктур, включающих углеродные нанотрубки или квантовые точки, для применения в нанoeлектронике, оптоэлектронике и солнечной энергетике.

В совокупности эти подходы подчёркивают важность вычислительного моделирования в продвижении науки о наноматериалах, предлагая идеи, которые направляют экспериментальный синтез и улучшают характеристики материалов.

Проектирование структуры дистанционного курса по моделированию наноматериалов

Объём дистанционного курса по моделированию наноматериалов составляет 4 зачетные единицы или 144 часа.

Первая тема дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению введения в моделирование наноматериалов. Вторая тема дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению методов моделирования на микроуровне и макроуровне. Третья тема дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению молекулярной динамики в моделировании наноматериалов. Четвёртая тема дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению метода Монте-Карло и его применения для моделирования наноматериалов. Пятая тема дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению квантово-механических методов моделирования наноматериалов. Шестая тема дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению моделирования механических свойств наноматериалов. Седьмая тема дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению тепловых и транспортных свойств наноматериалов. Восьмая тема дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению моделирования оптических свойств нанокompозитов и гибридных материалов. Девятая тема дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению анализа данных с использованием языка программирования Python. Десятая тема дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению самосборки и росту наноструктур. Одиннадцатая тема дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению пакетов Maple и Mathematica как инструменты моделирования наноматериалов и оптимизации параметров наноматериалов. Двенадцатая тема дистанционного

курса по моделированию наноматериалов посвящена работе с научной литературой и подготовке научной публикации в LaTeX и XeLaTeX в пакете MikTeX.

Разработка курса по моделированию наноматериалов в системе управления обучением MOODLE представляет собой многоэтапный процесс, начинающийся с анализа целевой аудитории и потребностей образования. На первом этапе формируется концепция курса, определяются его цели и задачи, проводится анализ современных подходов к обучению моделированию наноматериалов, а также оцениваются аналогичные образовательные программы. Далее разрабатывается структура курса, включающая логичное распределение модулей, тем и практических заданий, которые должны постепенно усложняться, обеспечивая системное освоение материала. Затем создаётся учебно-методическое обеспечение дистанционного курса по моделированию наноматериалов: лекции, презентации, видеоуроки, интерактивные материалы и дополнительные ресурсы, адаптированные для дистанционного формата настройки совместимости с платформой MOODLE. После подготовки контента курс загружается в систему, где каждому модулю присваиваются элементы в виде лекций, тестов, заданий и форумов для обсуждений. На этом этапе важна настройка автоматической проверки заданий, системы оценивания и обратной связи, что повышает эффективность обучения. Далее проводится тестирование функциональности курса: проверяется корректность отображения материалов, работа интерактивных элементов и техническая стабильность интеграции с модельными программами. После устранения выявленных недостатков курс апробируется на фокус-группе студентов и преподавателей, собирается их обратная связь, которая позволяет доработать содержание и методику подачи материала. Завершающим этапом становится официальный запуск курса и его масштабирование на целевую аудиторию, включая студентов вузов, аспирантов и специалистов, занимающихся нанотехнологиями. Одновременно внедряются инструменты мониторинга успеваемости и аналитики, позволяющие оценивать прогресс обучающихся и вносить дальнейшие корректировки. Постоянное обновление курса с учётом новых научных достижений в области наноматериалов и совершенствования цифровых обучающих технологий позволяет поддерживать его актуальность и эффективность в долгосрочной перспективе.

Результаты разработки структуры и элементов дистанционного курса по моделированию наноматериалов в системе управления обучением MOODLE

Первая лекция курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению введения в моделирование наноматериалов. Вторая лекция дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению методов моделирования на микроуровне и макроуровне. Третья лекция дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению молекулярной динамики в моделировании наноматериалов. Четвёртая лекция дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению метода Монте-Карло и его применение для моделирования наноматериалов. Пятая лекция дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению квантово-механическим методам моделирования наноматериалов. Шестая лекция дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению моделированию механических свойств наноматериалов. Седьмая лекция дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению тепловым и транспортным свойствам наноматериалов. Восьмая лекция дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению моделированию оптических свойств нанокластеров и гибридных материалов. Девятая лекция дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению анализа данных с исполь-

зованием языка программирования Python. Десятая лекция дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению самосборки и роста наноструктур. Одиннадцатая лекция дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена изучению пакетов Maple и Mathematica как инструментов моделирования наноматериалов и оптимизации параметров наноматериалов. Двенадцатая лекция дистанционного курса по моделированию наноматериалов посвящена работе с научной литературой и подготовке научной публикации в LaTeX и XeLaTeX в пакете MikTeX.

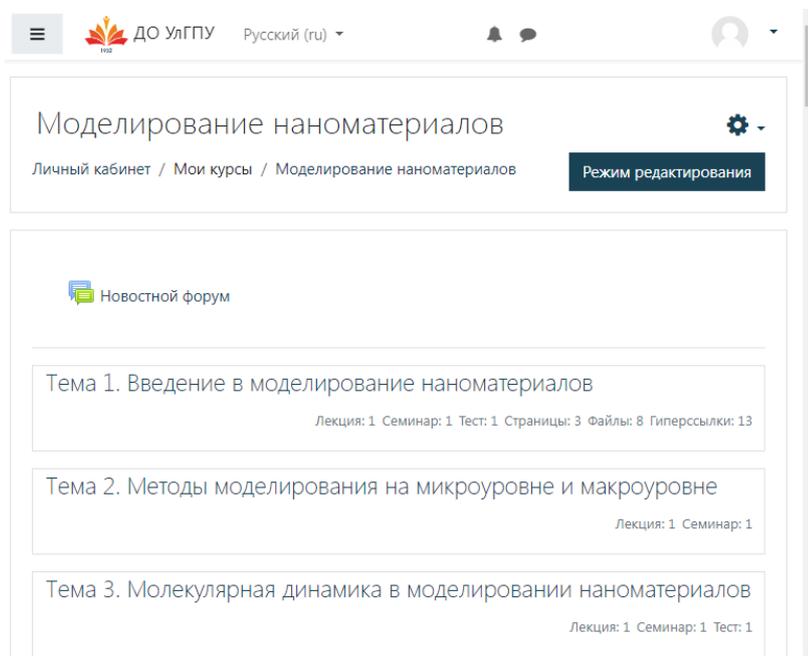


Рис. 1. Страница тематических модулей первой зачётной единицы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

На рис. 1 приведено изображение страницы тематических модулей первой зачётной единицы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

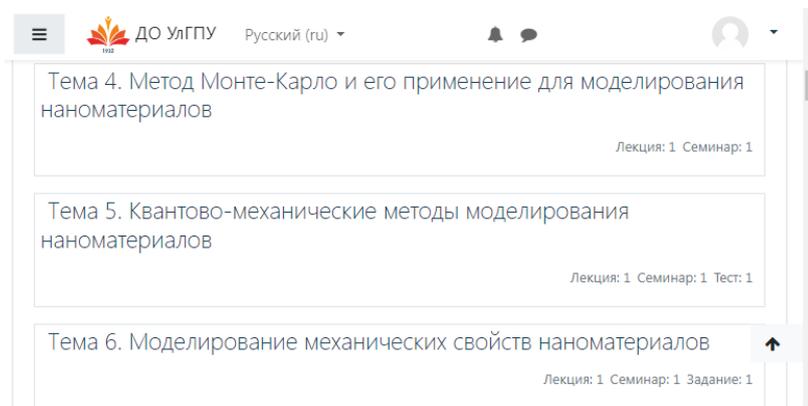


Рис. 2. Страница тематических модулей второй зачётной единицы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

На рис. 2 приведено изображение страницы тематических модулей второй зачётной единицы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

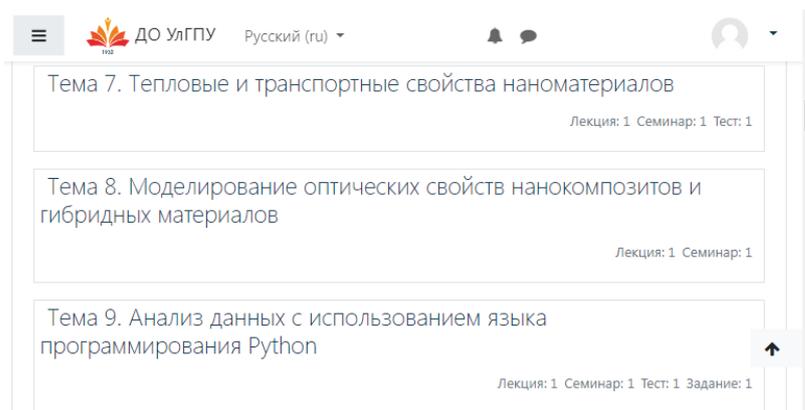


Рис. 3. Страница тематических модулей третьей зачётной единицы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

На рис. 3 приведено изображение страницы тематических модулей третьей зачётной единицы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

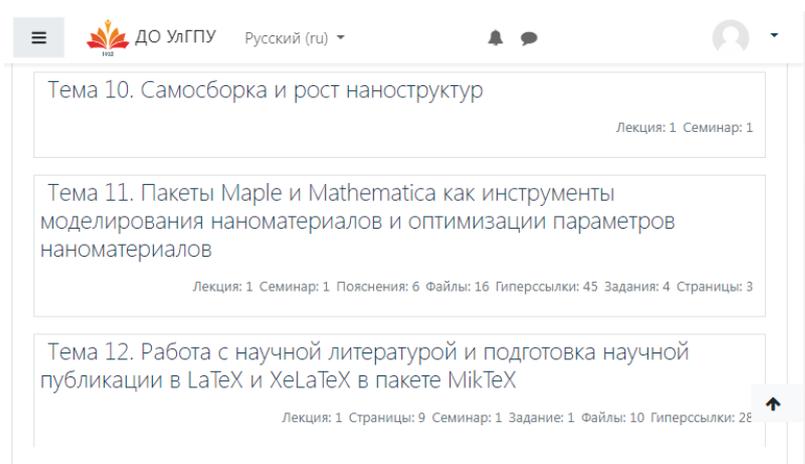


Рис. 4. Страница тематических модулей четвёртой зачётной единицы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

На рис. 4 приведено изображение страницы тематических модулей четвёртой зачётной единицы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

На рис. 5 приведено изображение страницы элементов первой темы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

На рис. 6 приведено изображение страницы элементов второй темы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

На рис. 7 приведено изображение страницы элементов третьей темы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

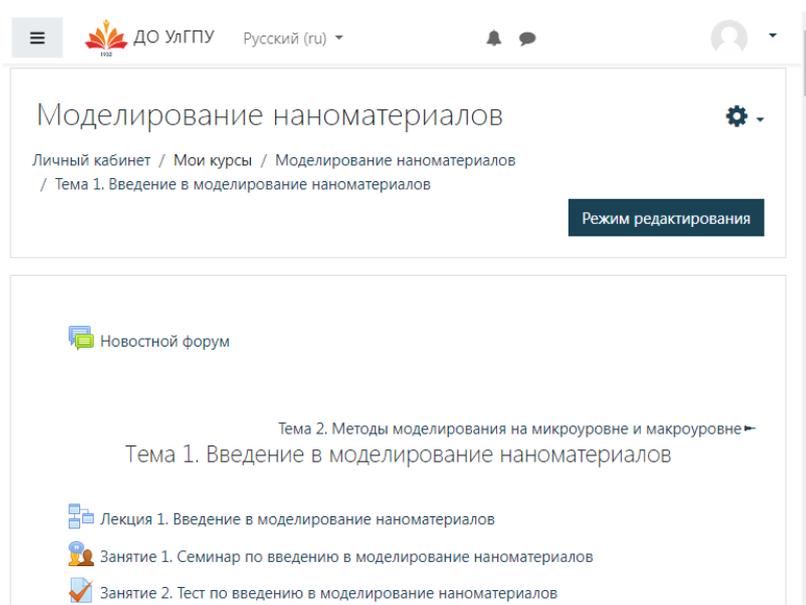


Рис. 5. Страница элементов первой темы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

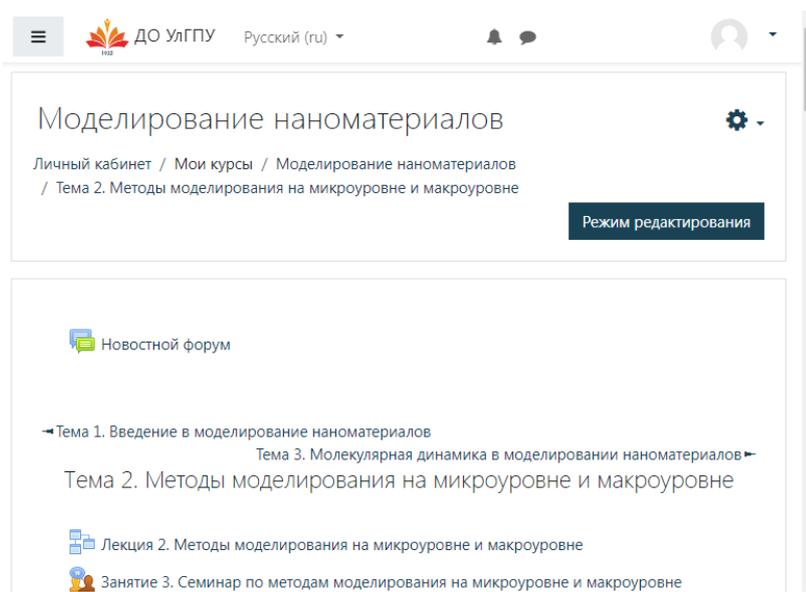


Рис. 6. Страница элементов второй темы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

Первое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме семинара по введению в моделирование наноматериалов. Второе занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме теста по введению в моделирование наноматериалов. Третье занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме семинара по методам моделирования на микроуровне и макроуровне. Четвёртое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме семинара по молекулярной динамике в моделировании наноматериалов. Пятое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме теста по молекулярной динамике в моделировании наноматериалов. Шестое занятие дистанционного курса по моде-

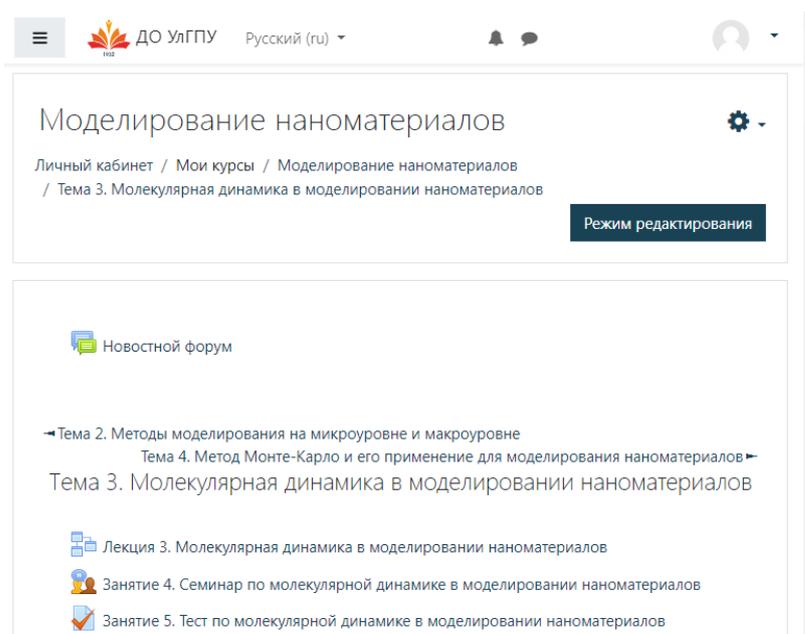


Рис. 7. Страница элементов третьей темы дистанционного курса по моделированию наноматериалов, созданного на образовательном портале университета в системе управления обучением MOODLE.

лированию наноматериалов проводится в форме семинара по методу Монте–Карло и его применения для моделирования наноматериалов. Седьмое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме семинара по квантово-механическим методам моделирования наноматериалов. Восьмое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме теста по квантово-механическим методам моделирования наноматериалов. Девятое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме семинара по моделированию механических свойств наноматериалов. Десятое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме контрольной работы по моделированию механических свойств наноматериалов. Одиннадцатое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме семинара по тепловым и транспортным свойствам наноматериалов. Двенадцатое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме теста по тепловым и транспортным свойствам наноматериалов. Тринадцатое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме семинара по моделированию оптических свойств нанокompозитов и гибридных материалов. Четырнадцатое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме семинара по анализу данных с использованием языка программирования Python. Пятнадцатое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме теста по анализу данных с использованием языка программирования Python. Шестнадцатое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме обсуждения выполнения задания с рефератом по анализу данных с использованием языка программирования Python. Семнадцатое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме семинара по сборке и росту наноструктур. Восемнадцатое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме семинара по пакетам Maple и Mathematica как инструментам моделирования наноматериалов и оптимизации параметров наноматериалов. Девятнадцатое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме семинара по работе с научной литературой и подготовке научной

публикации в LaTeX и XeLaTeX в пакете MikTeX. Двадцатое занятие дистанционного курса по моделированию наноматериалов проводится в форме теста по работе с научной литературой и подготовке научной публикации в LaTeX и XeLaTeX в пакете MikTeX.

Результаты разработки лекции по нанотехнологиям в составе дистанционного курса по моделированию наноматериалов в системе управления обучением MOODLE

Начинаем лекцию, как в отправной точке: «начиная с милли (10^{-3}), затем микро (10^{-6}) и теперь нано (10^{-9}) было достигнуто на пути миниатюризации. «Малое» становится всё меньше и меньше. Это доказательство во многих областях и с большим влиянием на нашу жизнь, как это происходит с этой технологией, которая, как это ни парадоксально, имеет наибольшее. Короче говоря, «маленькое прекрасно». Вкратце, конечно, пико (10^{-12}), затем фемто (10^{-15}) появятся. Однако пока оставайтесь в наном мире». Нанотехнология является относительно новой темой в научных исследованиях. Однако центральные концепции существуют в течение более длительного периода.

В 1959 году Фейнман был тем, кто первым говорил о возможности применения нанотехнологий, выступая в Калифорнийском технологическом институте. В 1974 году японский профессор Норио Танигучи придумал термин «нанотехнология», работая над разработкой сверхточных станков. Он обозначил прецизионную обработку с допуском в один микрон или меньше. Инновации 80-х годов в области нанотехнологий позволили наблюдать материалы в несравненном атомном масштабе. Очень мощные компьютеры сделали возможным моделирование крупномасштабных материальных систем, изучение их структур и свойств, а также производство новых материалов.

После изобретения сканирующего туннельного микроскопа в 1981 году и открытия фуллеренов в 1985 году одним из исключительных открытий в технологических областях, рассматривающих наномасштаб, стало именно открытие углеродных нанотрубок в 1991 году. К концу 20-го века инициативы в области нанотехнологий значительно увеличили мощь нанотехнологий; и стали возможны новые огромные систематические достижения в этой области. В начале 2000-х годов дискуссии вокруг потенциальных последствий нанотехнологий и осуществимости возможных приложений, рассматривающих молекулярные нанотехнологии, заставили эту область обрести стратегический интерес, побудив правительства содействовать финансированию ее развития.

Развитие в 21 веке придало этой области консолидацию и силу, чтобы считать ее одной из самых многообещающих областей в современном обществе. Инвестиций в США достаточно, чтобы осознать масштаб и важность этого сектора. Только США инвестировали более 18 миллиардов долларов в период с 2001 по 2013 год через Национальную нанотехнологическую инициативу, намереваясь сделать этот сектор двигателем экономического роста и конкурентоспособности. Эту важность подчеркивает Роко (2011): «по состоянию на 2009 год эти новые знания лежали в основе примерно четверти триллиона долларов США мирового рынка, из которых около 91 миллиарда долларов США приходилось на продукты США, включающие наноразмерные компоненты». Сегодня среди огромных инвестиций в самые разные области нанотехнологий, примеры микропроизводства, органической химии и молекулярной биологии являются примерами, где очень крупные инвестиции в нанотехнологии делаются. Как и в других частях мира, эта растущая важность нанотехнологий также заставила Европу столкнуться с вызовом и развивать сектор как главную цель для Европейского Союза. На сайте Европейской комиссии эта цель четко определена, и развитие нанотехнологий считалось приоритетом. Таким образом, программа Horizon 2020 была направлена на «преодоление разрыва между исследованиями в области нанотехнологий и рынками и реализа-

цию потенциального вклада в устойчивый рост, конкурентоспособность, окружающую среду, высококвалифицированные рабочие места и повышение качества жизни. Необходимо устранить несколько барьеров, чтобы использовать крупномасштабное внедрение на рынок инновационных, безопасных и устойчивых продуктов с нанотехнологиями».

Манипуляция материей с использованием нанотехнологий в атомном, молекулярном и супрамолекулярном масштабе позволяет формировать структуры материалов в наномасштабе, достигая исключительных внутренних свойств, делая возможными новые и революционные приложения. Нанонаука развивается во многих различных научных областях, например, в машиностроении, химии, физике, биологии, материаловедении, а также в фармацевтике, электронике, энергетике, текстильной промышленности, производстве покрытий и живописи.

В этом наномире нанонаука изучает чрезвычайно малые вещи. Нанонаука изучает материю, частицы, структуры в масштабе нанометров (одна миллионная миллиметра, масштаб атомов и молекул). Специальные микроскопы дают возможность заглянуть в эту маленькую реальность и позволяют изготавливать и манипулировать наноэлементами. Манипулирование материалами в этом масштабе позволяет разрабатывать структуры с другими свойствами, чем в макромасштабе (квантово-механические эффекты становятся важными в наномасштабе). Получаются несколько видов материалов с определенными характеристиками в терминах электрических, механических или оптических свойств, которые определяются тем, как молекулы и атомы собираются в наномасштабе в более крупные структуры. Когда размер материала уменьшается до нанометрового диапазона, химические, физические и биологические свойства материала изменяются, что полностью отличается от свойств их отдельных атомов, молекул или объемных материалов.

Разработки в области нанонауки делают возможными инновации в очень большом наборе областей. Открытие малого мира материи, допускаемое технологией, усиливает возможность больших «приключений» в прогрессе качества жизни человечества, учитывая все эти бесчисленные области.

К концу 20-го века, в период с 1998 по 2000 год, разрозненные области наномасштабной науки и техники были объединены под единым научно обоснованным определением нанотехнологии. Это видение позволило бы дать определение, которое воспроизводится следующим образом. «Нанотехнология — это способность контролировать и реструктурировать материю на атомном и молекулярном уровнях в диапазоне приблизительно 1–100 нм и использовать различные свойства и явления в этом масштабе по сравнению с теми, которые связаны с отдельными атомами или молекулами или поведением в объеме. Цель состоит в том, чтобы создавать материалы, устройства и системы с принципиально новыми свойствами и функциями путем проектирования их малой структуры. Это конечный рубеж для экономичного изменения свойств материалов и наиболее эффективный масштаб длины для производства и молекулярной медицины. Те же принципы и инструменты применимы к различным областям релевантности и могут помочь создать объединяющую платформу для науки, инженерии и технологий в наномасштабе. Переход от поведения отдельных атомов или молекул к коллективному поведению атомных и молекулярных ансамблей встречается в природе, и нанотехнология использует этот естественный порог». После публикации этого определения в 1999 году оно будет принято в следующем году в качестве официального документа Национальным советом по науке и технологиям США).

После консультаций со многими мировыми экспертами приведенное выше определение было согласовано в тот период (1998–1999 гг.) и получило в некоторой степени международное признание. Ранее существовало концептуально иное видение, более сосредоточенное либо на малой детали заданного размера, либо на сверхточной инжене-

рии, сверхдисперсиях или создании узоров атомов и молекул на поверхностях. Представленное выше определение нанотехнологии дало бы пространство для руководства по открытию и инновациям в области нанотехнологий в будущем, во многих междисциплинарных и многодоменных видах деятельности. Для Национальной нанотехнологической инициативы США нанотехнология — это понимание и контроль материи в размерах приблизительно от 1 до 100 нанометров, где уникальные явления позволяют использовать новые приложения. Охватывая наномасштабную науку, инженерию и технологию, нанотехнология включает в себя визуализацию, измерение, моделирование и манипулирование материей в этом масштабе длины (Национальная нанотехнологическая инициатива, цитируется в Ridge, 2018). GAEU Consulting определяет нанотехнологию как область науки и техники, где явления, происходящие в наномасштабе (10^{-9} м), используются при проектировании, характеристике, производстве и применении материалов, структур, устройств и систем. Наноматериалы (материалы с по крайней мере одним измерением или аспектом ниже 100 нм) могут встречаться в природе, например, дым, сажа, пыль или песок. Другие использовались задолго до того, как стало известно, что они являются наноматериалами, например, кремний и технический углерод.

Нанотехнология охватывает науку, технику и технологию в наномасштабе, который составляет около 1–100 нанометров. Нанометр — это одна миллиардная часть метра. Для справки: толщина листа бумаги составляет около 100000 нанометров. Наноразмерная материя может вести себя иначе, чем тот же объемный материал. Например, температура плавления материала, цвет, прочность, химическая активность и многое другое могут изменяться в наномасштабе (Национальный совет по науке и технологиям, Комитет по технологиям – Подкомитет по наномасштабной науке, технике и технологиям, 2018).

Нанотехнология, как применение нанонауки, приводит к использованию новых наноматериалов и наноразмерных компонентов, позволяющих создавать полезные и революционные продукты и устройства. Поскольку нанотехнология используется для манипулирования материей (в атомном, молекулярном и супрамолекулярном масштабе), структуры материалов в наномасштабе будут достигать необычайных свойств, как было показано ранее. Подчеркивая важность областей, в которых используется нанотехнология, можно выделить некоторые области, в которых намерены представить некоторые разработки в качестве примеров огромных достижений в области нанотехнологий. Такие области, которые будут рассмотрены ниже с точки зрения примеров приложений, включают, например, здравоохранение и медицину, энергетику, промышленность (например, безопасность пищевых продуктов), электронику и информационные технологии, военную и национальную безопасность, транспорт или науку об окружающей среде, которые являются лишь некоторыми из множества областей, которые могут извлечь выгоду из этих достижений. Поскольку нанотехнология заняла привилегированное место в мире науки и техники, она позволила существенно изменить способ мышления исследователей и является ключевой в будущих технологиях и решениях.

В области современной энергетики нанотехнологии уже достигли значительных успехов, что позволяет добиться гораздо более эффективной производительности и снижения затрат. Можно привести несколько примеров применения нанотехнологий в этой области. Представим некоторые приложения в различных областях энергетики, например, в топливных элементах, солнечных батареях или батареях. В энергетическом секторе, то есть технология наноматериалов вмешивается на ряде этапов потока энергии, который начинается с первичных источников энергии и заканчивается у конечного пользователя. Есть всего несколько примеров, которые доказывают, что ограничение в невозобновляемых источниках энергии (нефть, газ, уголь и ядерная энергия) может быть решено технологическими разработками, направленными на повышение эффек-

тивности и сокращение выбросов возобновляемых источников энергии. Эти решения как в энергетике, так и в других секторах в целом требуют преодоления нескольких технологических ограничений, для которых нанотехнологии предоставляют уникальную возможность. Топливные элементы извлекли большую выгоду из разработок нанонауки и нанотехнологий. Снижение стоимости катализаторов, которые используются в топливных элементах для получения ионов водорода из топлива (например, метанола), достигается. Эти катализаторы (как в случае платины, наиболее используемой в этих процессах) могут быть очень дорогими. Для этого процесса используются наночастицы платины, что позволяет снизить стоимость процесса, как только количество платины уменьшается. Кроме того, могут также использоваться наночастицы других материалов (например, графен, покрытый наночастицами кобальта), что полностью заменяет платину с очевидным снижением затрат. Также большая эффективность достигается в мембранах, которые используются в топливных элементах в процессе разделения ионов водорода от других газов, таких как кислород. В этой ситуации мембраны, содержащиеся в топливных элементах, пропускают ионы водорода через элемент, но не другие атомы или ионы, такие как кислородные, которые не проходят. Более эффективные мембраны производятся с использованием нанотехнологий, что делает топливные элементы более прочными и маневренными. Кроме того, в ноутбуках или карманных персональных компьютерах нанотехнологии могут позволить заменить батареи небольшими топливными элементами (многие из которых используют метанол), которые служат дольше обычных батарей. Эти топливные элементы также позволяют повторно вставлять новый картридж с метанолом вместо электрической подзарядки батареи, экономя, например, время на её подзарядку. Кроме того, электромобили могут извлечь выгоду из нанотехнологических разработок топливных элементов, позволяющих заменять их батареи этими топливными элементами. Наиболее предлагаемым топливом для этих топливных элементов в автомобилях на топливных элементах является водород. Кроме того, в области солнечных элементов нанотехнологии поддерживают более низкие затраты на новые типы солнечных элементов, либо на производство, либо на установку. Батареи используются во многих областях, таких как транспорт, электроника, медицинское оборудование, электроинструменты, хранение электроэнергии. Растущие технологические возможности для улучшения плотности энергии и сокращения времени зарядки сейчас уступают место колоссальным растущим знаниям в области нанотехнологий и её потенциалу для инноваций. Новые нанотехнологические батареи могут обеспечить эти колоссальные новые преимущества (такие как сокращение времени подзарядки, увеличение доступной мощности или снижение рисков). Нанотехнологии могут повысить безопасность аккумуляторов, уменьшив или исключив вероятность короткого замыкания.

Промышленность — это экономическая сфера, где используются нанотехнологии, будучи материей, обрабатываемой на молекулярном или атомном уровне. Разработки в области нанонауки и нанотехнологий открывают новые и очень инновационные приложения в промышленности в нескольких различных областях. Действительно, нанотехнологии оказываются очень эффективными, используя очень разнообразные методы и приемы в приложениях к ряду областей, как в промышленном секторе. Разработки в области нанотехнологий позволяют улучшить, а часто и полностью преобразовать, методы и приемы промышленного производства, многие из используемых технологий и многие секторы промышленности, позволяя совершенно новый и эффективный способ производства. В любом случае, необходимо провести много исследований для сертификации этих технологий. Например, в пищевой промышленности требуются дополнительные исследования для изучения эффектов, возникающих в результате технологий переработки пищевых продуктов, материалов для упаковки пищевых продуктов или

пищевых ингредиентов, которые являются многообещающими областями, в которых нанотехнологии продвигаются и ищут потенциальные преимущества, хотя также изучаются потенциальные неблагоприятные последствия для здоровья.

Заключение

Разработан структурированный дистанционный курс по компьютерному моделированию наноматериалов с использованием дистанционных технологий в системе управления обучением MOODLE.

Выводы по работе можно сформулировать следующим образом:

1. выполненный всесторонний анализ научной литературы показал актуальность исследования физических свойств мезоскопических систем для наполнения курса дистанционного курса по моделированию наноматериалов,
2. разработан структурированный дистанционный курс по моделированию наноматериалов, который может быть использован для подготовки специалистов в области нанотехнологий,
3. дистанционные методы обучения повышают вовлечённость студентов и качество усвоения материала дистанционного курса по моделированию наноматериалов.

Дистанционный курс по компьютерному моделированию наноматериалов построен с использованием модульной технологии построения курса, что позволяет эффективно управлять темпом продвижения по курсу по компьютерному моделированию наноматериалов и применять смешанную технологию в преподавании компьютерного моделирования наноматериалов.

Разработанный дистанционный курс по компьютерному моделированию наноматериалов готов к использованию в образовательном процессе педагогического университета с использованием дистанционных технологий в системе управления обучением MOODLE.

Гипотеза исследования, заключающаяся в том, что дистанционный курс по моделированию наноматериалов повысит доступность и качество обучения за счёт применения дистанционных технологий и практико-ориентированных методов обучения моделированию наноматериалов, подтверждена полностью.

Задачи работы решены полностью.

Теоретические аспекты внесли вклад в методику дистанционного обучения моделированию наноматериалов.

Курс может быть внедрён в образовательные программы вузов по техническим и инженерным направлениям подготовки.

Список использованных источников

1. Modeling carbon-based nanomaterials and derived composites and devices / Agustin Chiminelli [et al.] // Sensors. — 2024. — nov. — Vol. 24, no. 23. — P. 7665. — URL: <http://dx.doi.org/10.3390/s24237665>.
2. Sharma Mansi, Sharma Vishal. Modelling and simulations of nanomaterials // Nanotechnology: a quick guide to materials and technologies. — BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS, 2024. — oct. — P. 205–224. — ISBN: 9789815256772. — URL: <http://dx.doi.org/10.2174/9789815256772124010009>.
3. Bystrov Vladimir. Simulation and modeling of nanomaterials. — MDPI, 2022. — jul. — ISBN: 9783036547398. — URL: <http://dx.doi.org/10.3390/books978-3-0365-4740-4>.

4. Machine learning-driven nanomaterial design: predictive modeling for enhanced performance in electronics / Sheela Hundekari [et al.] // *Nanotechnology Perceptions*. — 2024. — nov. — P. 2039–2051. — URL: <http://dx.doi.org/10.62441/nano-ntp.vi.3066>.
5. Machine learning-driven nanomaterial design: predictive modeling for enhanced performance in electronics / Sheela Hundekari [et al.] // *Nanotechnology perceptions*. — 2024. — nov. — Vol. 20, no. S14. — URL: <http://dx.doi.org/10.62441/nano-ntp.v20is14.133>.
6. Integrated modeling, simulation, and visualization for nanomaterials / Feiwei Qin [et al.] // *Complexity*. — 2018. — jan. — Vol. 2018, no. 1. — URL: <http://dx.doi.org/10.1155/2018/5083247>.
7. An online nanoinformatics platform empowering computational modeling of nanomaterials by nanostructure annotations and machine learning toolkits / Tong Wang [et al.] // *Nano letters*. — 2024. — aug. — Vol. 24, no. 33. — P. 10228–10236. — URL: <http://dx.doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c02568>.
8. Modelling of low-dimensional functional nanomaterials / Kun Zhou [et al.] // *Physica status solidi (RRL) - rapid research letters*. — 2022. — mar. — Vol. 16, no. 3. — URL: <http://dx.doi.org/10.1002/pssr.202100654>.
9. Construction of a web-based nanomaterial database by big data curation and modeling friendly nanostructure annotations / Xiliang Yan [et al.] // *Nature communications*. — 2020. — may. — Vol. 11, no. 1. — URL: <http://dx.doi.org/10.1038/S41467-020-16413-3>.
10. K Gupta Tejendra, Varshney Gaurav. *Mathematical modeling in nanotechnology - an overview* // *Futuristic trends in chemical material sciences and nanotechnology*. Volume 3. Book 23. — Iterative International Publishers, Selfypage Developers Pvt Ltd, 2024. — feb. — P. 176–209. — ISBN: 9789357475327. — URL: <http://dx.doi.org/10.58532/v3becs23p3ch3>.
11. Kosti Siddhartha. *Nanomaterials and nanocomposites thermal and mechanical properties modelling* // *Nanotechnology in aerospace and structural mechanics*. — IGI Global, 2019. — P. 234–256. — ISBN: 9781522579229. — URL: <http://dx.doi.org/10.4018/978-1-5225-7921-2.CH007>.
12. Jadhav Chetan C. and Pawar Pratik J., Gavali Sachin R. *Implementation of VIB (virtual internal bond) model in nanomaterial by using finite element approach* // *Techno-Societal* 2018. — Springer International Publishing, 2019. — nov. — P. 391–396. — ISBN: 9783030169626. — URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-030-16962-6_40.
13. *Predictive modeling of nanomaterial biological effects* / Xiong Liu [et al.] // *2012 IEEE International conference on bioinformatics and biomedicine workshops*. — IEEE, 2012. — oct. — P. 859–863. — URL: <http://dx.doi.org/10.1109/BIBMW.2012.6470254>.
14. Fitzgerald G., DeJoannis J., Meunier M. *Multiscale modeling of nanomaterials* // *Modeling, characterization, and production of nanomaterials*. — Elsevier, 2015. — P. 3–53. — ISBN: 9781782422280. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-1-78242-228-0.00001-6>.

15. Burello Enrico, Worth Andrew P. QSAR modeling of nanomaterials // WIREs nanomedicine and nanobiotechnology. — 2011. — mar. — Vol. 3, no. 3. — P. 298–306. — URL: <http://dx.doi.org/10.1002/WNAN.137>.
16. In silicoprofiling nanoparticles: predictive nanomodeling using universal nanodescriptors and various machine learning approaches / Xiliang Yan [et al.] // Nanoscale. — 2019. — Vol. 11, no. 17. — P. 8352–8362. — URL: <http://dx.doi.org/10.1039/C9NR00844F>.
17. Buckeridge John, Sokol Alexey A. One-dimensional nanosystems // Computational modeling of inorganic nanomaterials. — CRC Press, 2016. — apr. — P. 61–96. — ISBN: 9780429194184. — URL: <http://dx.doi.org/10.1201/B19528-8>.
18. Continuum-based and cluster models for nanomaterials / D. Qian [et al.] // Multiscaling in molecular and continuum mechanics: interaction of time and size from macro to nano. — Springer Netherlands, 2007. — P. 241–257. — ISBN: 9781402050619. — URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4020-5008-4_11.
19. Maniotis N. Multiphysics simulation on nanoparticle environmental paths and recovery // Nanoparticles as sustainable environmental remediation agents. — Royal Society of Chemistry, 2023. — oct. — P. 238–263. — ISBN: 9781837670215. — URL: <http://dx.doi.org/10.1039/bk9781837670215-00238>.
20. Chen Zhengzheng, Chen Rong, Shan Bin. Nanomaterial design and computational modeling // Nanomedicine. — Springer New York, 2014. — P. 63–82. — ISBN: 9781461421405. — URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4614-2140-5_4.
21. Artemieva Irene L., Ryabchenko Natalya V. Nanomaterials ontology model // Advanced Materials Research. — 2014. — apr. — Vol. 905. — P. 65–69. — URL: <http://dx.doi.org/10.4028/WWW.SCIENTIFIC.NET/AMR.905.65>.
22. Brenner Donald W. Computer modeling of nanostructured materials // Nanostructured materials. — Elsevier, 2007. — P. 293–328. — ISBN: 9780815515340. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-081551534-0.50009-9>.
23. Fomin A. S., Zhukovskii M. S., Beznosyuk A. S. Modeling of nanomaterial structure based on quantum-sized mesoparticles // Russian physics journal. — 2006. — jul. — Vol. 49, no. 7. — P. 754–757. — URL: <http://dx.doi.org/10.1007/S11182-006-0171-0>.
24. Oladele Odedele Timothy. Nanomaterials characterization using hybrid genetic algorithm based support vector machines // International journal of materials science and engineering. — 2014. — URL: <http://dx.doi.org/10.12720/IJMSE.2.2.107-114>.
25. Xiang Guolei, Wang Yang-Gang. Exploring electronic-level principles how size reduction enhances nanomaterial surface reactivity through experimental probing and mathematical modeling // Nano research. — 2021. — oct. — Vol. 15, no. 4. — P. 3812–3817. — URL: <http://dx.doi.org/10.1007/S12274-021-3910-1>.
26. Saikia Nabanita, Pandey Ravindra. Atomistic simulation of biological molecules interacting with nanomaterials // Modeling, characterization, and production of nanomaterials. — Elsevier, 2023. — P. 225–269. — ISBN: 9780128199053. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/b978-0-12-819905-3.00010-5>.

Сведения об авторах:

Анастасия Александровна Родионова — студент факультета физико-математического и технологического образования ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», Ульяновск, Россия.

E-mail: rod_nastay_0000@mail.ru

ORCID iD  0009-0001-1749-7450

Web of Science ResearcherID  ISA-2132-2023

Original article
PACS 01.40.Di
OCIS 000.2060
MSC 00A79

Development of a distance learning course on nanomaterial modeling

A. A. Rodionova 

Ulyanovsk State Pedagogical University, 432071, Ulyanovsk, Russia

Submitted May 12, 2025
Resubmitted May 15, 2025
Published June 14, 2025

Abstract. The results of the development of a distance course on modeling nanomaterials in the learning management system MOODLE are presented. The results of the development of the structure of the distance course on modeling nanomaterials, including theoretical modules, practical tasks on computer modeling, are described.

Keywords: course, distance learning course, learning management system, nanomaterial, nanomaterial modeling

References

1. Modeling carbon-based nanomaterials and derived composites and devices / Agustin Chiminelli [et al.] // *Sensors*. — 2024. — nov. — Vol. 24, no. 23. — P. 7665. — URL: <http://dx.doi.org/10.3390/s24237665>.
2. Sharma Mansi, Sharma Vishal. Modelling and simulations of nanomaterials // *Nanotechnology: a quick guide to materials and technologies*. — BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS, 2024. — oct. — P. 205–224. — ISBN: 9789815256772. — URL: <http://dx.doi.org/10.2174/9789815256772124010009>.
3. Bystrov Vladimir. Simulation and modeling of nanomaterials. — MDPI, 2022. — jul. — ISBN: 9783036547398. — URL: <http://dx.doi.org/10.3390/books978-3-0365-4740-4>.
4. Machine learning-driven nanomaterial design: predictive modeling for enhanced performance in electronics / Sheela Hundekari [et al.] // *Nanotechnology Perceptions*. — 2024. — nov. — P. 2039–2051. — URL: <http://dx.doi.org/10.62441/nano-ntp.vi.3066>.
5. Machine learning-driven nanomaterial design: predictive modeling for enhanced performance in electronics / Sheela Hundekari [et al.] // *Nanotechnology perceptions*. — 2024. — nov. — Vol. 20, no. S14. — URL: <http://dx.doi.org/10.62441/nano-ntp.v20is14.133>.

6. Integrated modeling, simulation, and visualization for nanomaterials / Feiwei Qin [et al.] // *Complexity*. — 2018. — jan. — Vol. 2018, no. 1. — URL: <http://dx.doi.org/10.1155/2018/5083247>.
7. An online nanoinformatics platform empowering computational modeling of nanomaterials by nanostructure annotations and machine learning toolkits / Tong Wang [et al.] // *Nano letters*. — 2024. — aug. — Vol. 24, no. 33. — P. 10228–10236. — URL: <http://dx.doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c02568>.
8. Modelling of low-dimensional functional nanomaterials / Kun Zhou [et al.] // *Physica status solidi (RRL) - rapid research letters*. — 2022. — mar. — Vol. 16, no. 3. — URL: <http://dx.doi.org/10.1002/pssr.202100654>.
9. Construction of a web-based nanomaterial database by big data curation and modeling friendly nanostructure annotations / Xiliang Yan [et al.] // *Nature communications*. — 2020. — may. — Vol. 11, no. 1. — URL: <http://dx.doi.org/10.1038/S41467-020-16413-3>.
10. K Gupta Tejendra, Varshney Gaurav. Mathematical modeling in nanotechnology - an overview // *Futuristic trends in chemical material sciences and nanotechnology*. Volume 3. Book 23. — Iterative International Publishers, Selfypage Developers Pvt Ltd, 2024. — feb. — P. 176–209. — ISBN: 9789357475327. — URL: <http://dx.doi.org/10.58532/v3becs23p3ch3>.
11. Kosti Siddhartha. Nanomaterials and nanocomposites thermal and mechanical properties modelling // *Nanotechnology in aerospace and structural mechanics*. — IGI Global, 2019. — P. 234–256. — ISBN: 9781522579229. — URL: <http://dx.doi.org/10.4018/978-1-5225-7921-2.CH007>.
12. Jadhav Chetan C. and Pawar Pratik J., Gavali Sachin R. Implementation of VIB (virtual internal bond) model in nanomaterial by using finite element approach // *Techno-Societal 2018*. — Springer International Publishing, 2019. — nov. — P. 391–396. — ISBN: 9783030169626. — URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-030-16962-6_40.
13. Predictive modeling of nanomaterial biological effects / Xiong Liu [et al.] // *2012 IEEE International conference on bioinformatics and biomedicine workshops*. — IEEE, 2012. — oct. — P. 859–863. — URL: <http://dx.doi.org/10.1109/BIBMW.2012.6470254>.
14. Fitzgerald G., DeJoannis J., Meunier M. Multiscale modeling of nanomaterials // *Modeling, characterization, and production of nanomaterials*. — Elsevier, 2015. — P. 3–53. — ISBN: 9781782422280. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-1-78242-228-0.00001-6>.
15. Burello Enrico, Worth Andrew P. QSAR modeling of nanomaterials // *WIREs nanomedicine and nanobiotechnology*. — 2011. — mar. — Vol. 3, no. 3. — P. 298–306. — URL: <http://dx.doi.org/10.1002/WNAN.137>.
16. In silicoprofiling nanoparticles: predictive nanomodeling using universal nanodescriptors and various machine learning approaches / Xiliang Yan [et al.] // *Nanoscale*. — 2019. — Vol. 11, no. 17. — P. 8352–8362. — URL: <http://dx.doi.org/10.1039/C9NR00844F>.
17. Buckeridge John, Sokol Alexey A. One-dimensional nanosystems // *Computational modeling of inorganic nanomaterials*. — CRC Press, 2016. — apr. — P. 61–96. — ISBN: 9780429194184. — URL: <http://dx.doi.org/10.1201/B19528-8>.

18. Continuum-based and cluster models for nanomaterials / D. Qian [et al.] // Multiscaling in molecular and continuum mechanics: interaction of time and size from macro to nano. — Springer Netherlands, 2007. — P. 241–257. — ISBN: 9781402050619. — URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4020-5008-4_11.
19. Maniotis N. Multiphysics simulation on nanoparticle environmental paths and recovery // Nanoparticles as sustainable environmental remediation agents. — Royal Society of Chemistry, 2023. — oct. — P. 238–263. — ISBN: 9781837670215. — URL: <http://dx.doi.org/10.1039/bk9781837670215-00238>.
20. Chen Zhengzheng, Chen Rong, Shan Bin. Nanomaterial design and computational modeling // Nanomedicine. — Springer New York, 2014. — P. 63–82. — ISBN: 9781461421405. — URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4614-2140-5_4.
21. Artemieva Irene L., Ryabchenko Natalya V. Nanomaterials ontology model // Advanced Materials Research. — 2014. — apr. — Vol. 905. — P. 65–69. — URL: <http://dx.doi.org/10.4028/WWW.SCIENTIFIC.NET/AMR.905.65>.
22. Brenner Donald W. Computer modeling of nanostructured materials // Nanostructured materials. — Elsevier, 2007. — P. 293–328. — ISBN: 9780815515340. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-081551534-0.50009-9>.
23. Fomin A. S., Zhukovskii M. S., Beznosyuk A. S. Modeling of nanomaterial structure based on quantum-sized mesoparticles // Russian physics journal. — 2006. — jul. — Vol. 49, no. 7. — P. 754–757. — URL: <http://dx.doi.org/10.1007/S11182-006-0171-0>.
24. Oladele Odedele Timothy. Nanomaterials characterization using hybrid genetic algorithm based support vector machines // International journal of materials science and engineering. — 2014. — URL: <http://dx.doi.org/10.12720/IJMSE.2.2.107-114>.
25. Xiang Guolei, Wang Yang-Gang. Exploring electronic-level principles how size reduction enhances nanomaterial surface reactivity through experimental probing and mathematical modeling // Nano research. — 2021. — oct. — Vol. 15, no. 4. — P. 3812–3817. — URL: <http://dx.doi.org/10.1007/S12274-021-3910-1>.
26. Saikia Nabanita, Pandey Ravindra. Atomistic simulation of biological molecules interacting with nanomaterials // Modeling, characterization, and production of nanomaterials. — Elsevier, 2023. — P. 225–269. — ISBN: 9780128199053. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/b978-0-12-819905-3.00010-5>.

Information about authors:

Anastasia Alexandrovna Rodionova — student of the Faculty of Physics, Mathematics and Technological Education of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education “Ulyanovsk State Pedagogical University”, Ulyanovsk, Russia.

E-mail: rod_nastay_0000@mail.ru

ORCID iD  0009-0001-1749-7450

Web of Science ResearcherID  ISA-2132-2023