

Компьютерный дизайн молекул и материалов: от школы до аспирантуры

Анатолий Коркин

*Arizona State University
Nano and Giga Solutions, Inc.*



Anatoli Korkin
September 2020



Brief professional history

- MS from Mendeleev University of Chemical Technology of Russia
- PhD from Lomonosov Moscow State University
- 10 years researcher in Soviet Union Academy of Science
- 4 years research in Germany: University of Erlangen-Nurnberg and Max-Planck Institute in Muelheim-an-der-Ruhr
- 2 years research at the University of Florida
- 6 years R & D at Motorola, Phoenix, Arizona
- 9 years at Arizona State University
- Short research visits at Dalhousie University, Canada, Tyndall Institute, Ireland, and University of Tokyo, Japan
- 17 years of consulting experience



*I. Международная сетевая гибридная (онлайн и он-кампус) PhD программа
"Теория и Компьютерный Дизайн
Функциональных Материалов"*



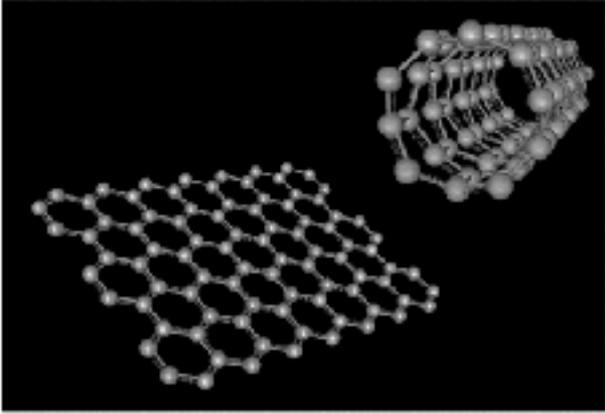
Предпосылки и предистория

- В современном мире ни одна область материаловедения от фармакологии до строительства не обходится без теории и моделирования.
- В СССР были сильные школы по теоретической химии и физике молекул и твердого тела, многие из которых перестали существовать из-за эмиграции и ухода и в мир иной их создателей и ведущих экспертов.
- Возрождение и расширение данного направления науки и образования в России актуально и может быть реализовано в кооперации российских и зарубежных ученых, в том числе представителей научной диаспоры

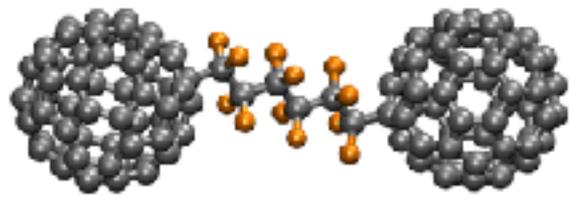
с использованием методов онлайн образования
и дистанционного управления
проектами и интернет коммуникации



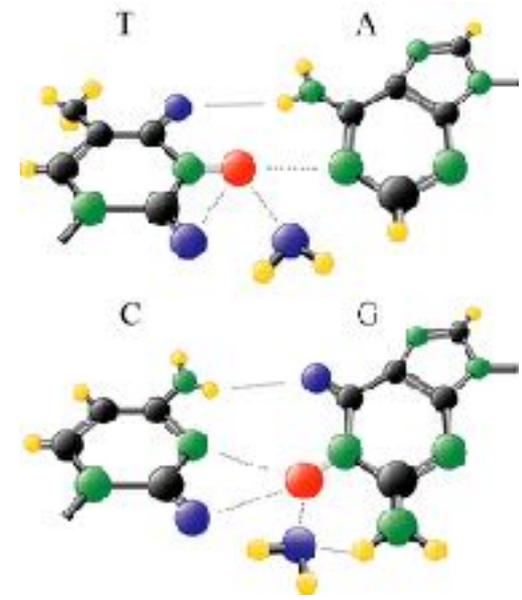
О каких материалах идет речь



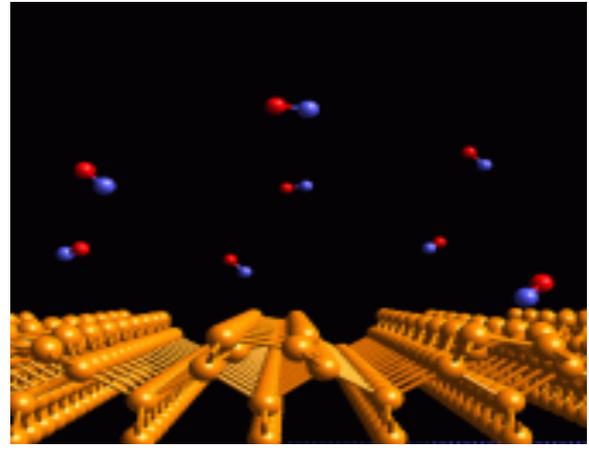
Graphene and carbonanotube



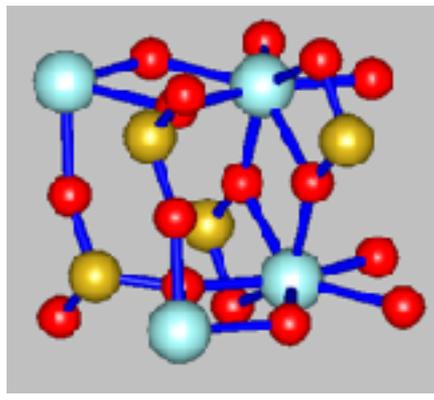
Molecular electronic device



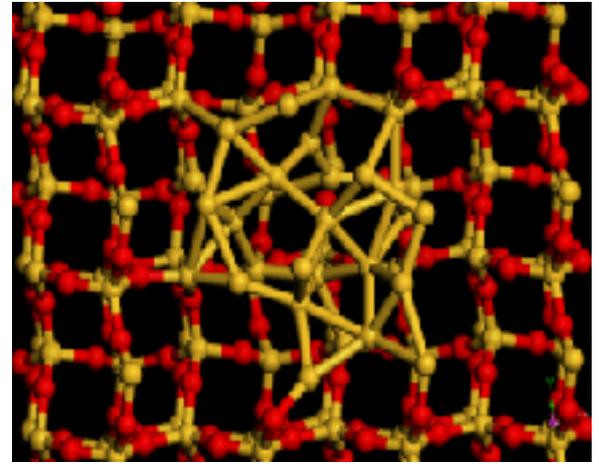
DNA building blocks



Si surface + NO molecules



Zircon, $ZrSiO_4$



SiO_2 crystal with Si dot inside



Что мы предлагаем

Разработка международной образовательной PhD программы по теории и компьютерному дизайну функциональных материалов.
(Theoretical and Computational Molecular and Material Science)

Алгоритм и пошаговая инструкция

1. Собрать консорциум заинтересованных экспертов и научно-образовательных организаций (в первую очередь университетов)
2. Разработать прототип курикулума (учебного плана).
3. Разработать логистическую и финансовую модель устойчивого развития и долгосрочного функционирования программы
4. Получение инвестиций от партнеров и фондов на развитие программы (1-й этап)



Алгоритм и пошаговая инструкция (Продолжение)

5. Выбор и внедрение отдельных курсов на кампусах и онлайн программ университетов-партнеров в рамках существующих программ для PhD студентов (курсы по выбору) и дополнительного образования (сертификаты).
 6. Создание массовой маркетинговой поддержки программы на российском и международном рынке образовательных услуг
 7. Получение грантов на развитие программы и оплаты за обучение (2-этап)
 8. Внедрение и открытие полноценных PhD в университетах партнерах (Россия, США, Европа, Китай ...)
 9. Устойчивое развитие и функционирование программы. Источники финансирования: гранты и оплата за обучение, заказные научные исследования, конференции, публикации, коммерциализация софта и консультации.
 10. Создание института (российского, российско-американского, международного, ...) теории и компьютерного дизайна функциональных материалов.
-



Логистика программы

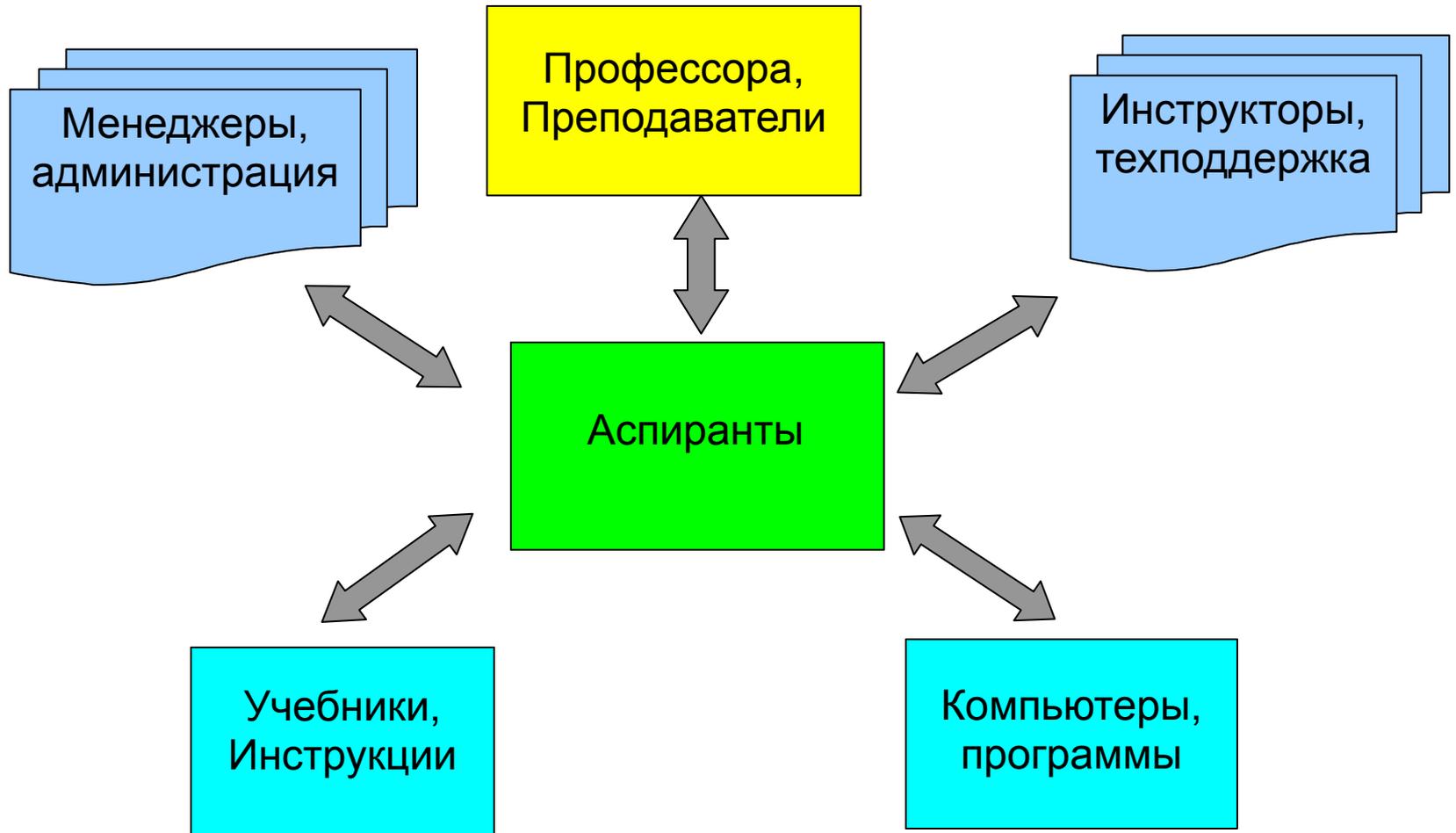
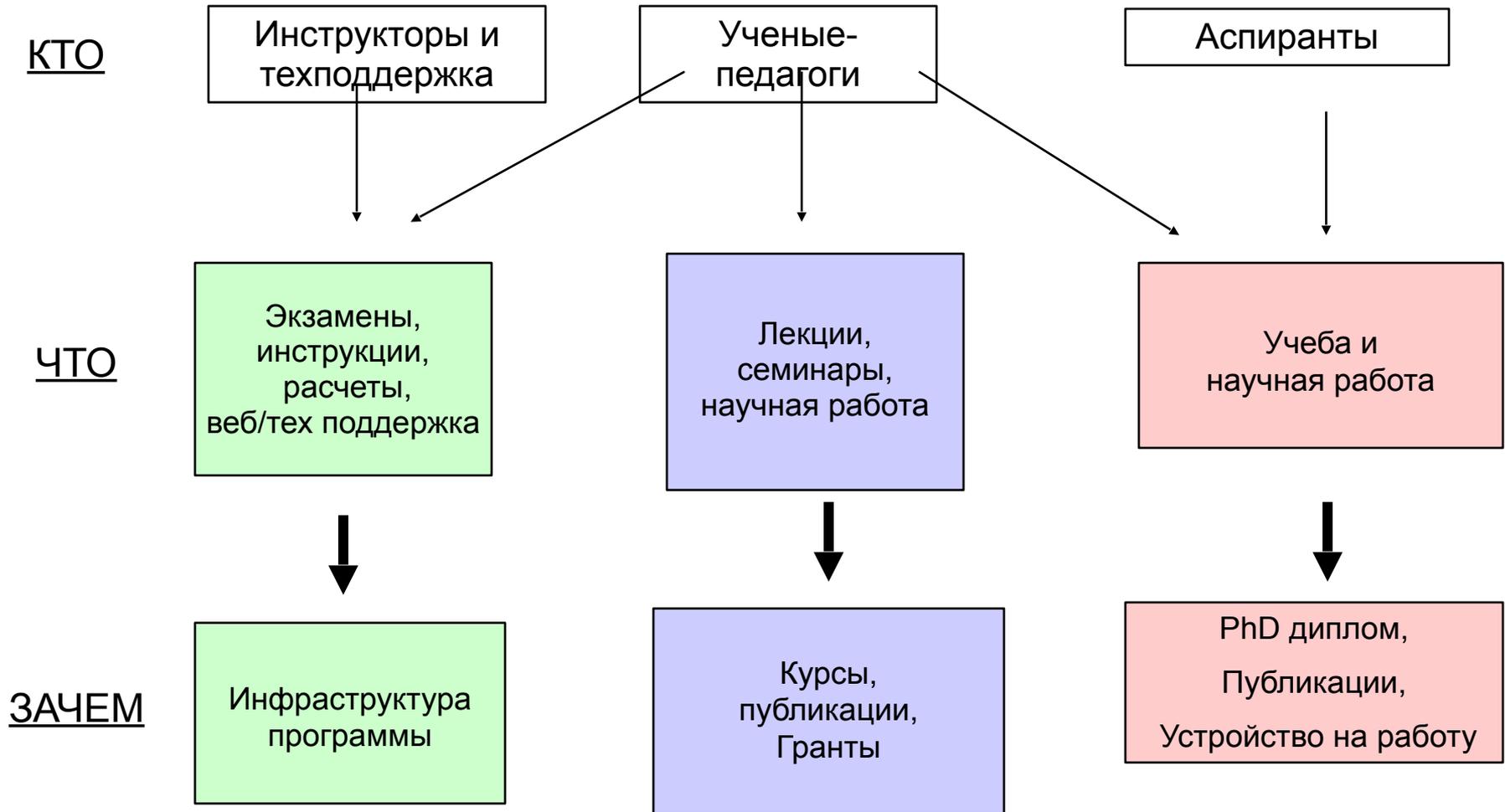


Схема научно-образовательной деятельности



Логистика программы: Что и как делаем

Участники программы

- Профессора: составляют учебные планы курсов, ведут лекции и веб/сем/инары, осуществляют запись лекций на видео, ведут научную работу с аспирантами (PhD students);
- преподаватели: ведут лекции и веб/сем/инары, осуществляют запись лекций на видео, принимают зачеты и экзамены;
- инструкторы - оказывают техническую помощь на лекциях, веб/сем/инарах, экзаменах, и при выполнении расчетных задач;
- технические эксперты (программисты, веб дизайнеры, специалисты по вычислительной технике): развитие и техническая поддержка программы;
- "эффективные менеджеры": развивают и поддерживают логистику, финансовую модель и инфраструктуру программы;
- аспиранты: учатся и занимаются научной работой;
- меценаты: содействуют устойчивому развитию программы



Логистика программы: Продолжение

Внешние взаимодействия

- Университеты-партнеры заключают между собой договоры о взаимном признании курсов, совместных инвестициях в развитие программы и совместном использовании вычислительных ресурсов и персонала.
- Профессора осуществляют научное руководство аспирантами совместно с коллегами университетов-партнеров;
- Независимые ученые, преподаватели, инструкторы и технические эксперты заключают договора с университетами на участие в программе;
- Университеты-партнеры заключают договора об использовании принадлежащей им и "совместно нажитой" интеллектуальной собственности, совместных заявках на гранты и научной деятельности на коммерческой основе (работа с компаниями).
- Аспиранты числятся в одном из университетов партнеров и получают в них PhD дипломы. Возможны договоры о выдаче двух или двойных дипломов в зависимости от законодательств в государствах, где университеты партнеры осуществляют свою научно педагогическую деятельность



Аналогичные программы: Примеры I (Chemistry)

University of San Diego: PhD and MS in Theoretical and Computational Chemistry: <https://chemistry.ucsd.edu/graduate-program/program-tracks/theoretical-computational.shtml>

Southern Methodist University at Dallas: PhD in Theoretical and computational chemistry: <https://sites.smu.edu/dedman/catco/graduate-program.html>

Michigan State University: MS in Computational Chemistry:
<https://reg.msu.edu/academicprograms/ProgramDetail.aspx?Program=3997&PType=DP>

Illinois Institute of Technology: BS in Computational Chemistry and Biochemistry: <https://science.iit.edu/programs/undergraduate/bachelor-science-computational-chemistry-and-biochemistry>



Аналогичные программы: Примеры II (Materials)

Malmo University: MS in Computational Materials Science: [https://
edu.mau.se/TACMA](https://edu.mau.se/TACMA)

Technical University of Freiburg: MS in Computational Materials Science:
<https://tu-freiberg.de/en/studies/master-computational-materials-science>

University of Erlangen-Nurnberg: MS in Computational Materials Science:
<https://www.ce.studium.fau.eu/prospective-students/technical-application-fields-taf/computational-material-science/>

Boise state University: Certificate program in Computational Materials and Engineering: [https://www.boisestate.edu/graduatecollege/programs2/
computational-materials-science-engineering/](https://www.boisestate.edu/graduatecollege/programs2/computational-materials-science-engineering/)



Эксперты в Университете Штата Аризона

Oliver Beckstein: Simulations of biomolecules

Antia Botana: Electronic structure of materials

Anrew Chizmeshya: Electronic structure of materials

Steve Goodnick: Theory and computations of semiconductors

Matthias Heyden: simulations of biomolecules

Anatoli Korkin: Applied quantum chemistry

Dmitry Matyushov: Simulations of biomolecules/theory

Vladimiro Mujica: Computations of materials and biomolecules/theory

Banu Ozkan: Simulations and theory of biomolecules

Steve Presse: Data analysis/theory

Arunima Singh: Electronic structure of materials

Abhishek Singharoy: Simulations of biomaterials

Petr Sulc: Simulations of biomolecules



*II. Дизайн молекул и кристаллов в школьном
образовании
Мост между образованием и наукой*



Что мы предлагаем

Atomic Scale Design = Ed Tech + Nano Tech

Разработка образовательной школьной программы по обучению компьютерному дизайну молекул и кристаллов

1. Выбрать прототипы необходимых для адаптации компьютерных программ
2. Разработать бизнес модель, создать команду и найти источники финансирования
3. Создать бета-версию программы и разработать учебный план
4. Внедрить программу в экспериментальной школе
5. Внедрить программу в образование в России



Atomic Scale Design Software: Что, как и зачем

У компьютерных программ есть графический интерфейс и вычислительная "кухня" для приготовления молекул и кристаллов из атомов

На атомном уровне химия, физика и биология - это общий свод законов квантовой механики, что помогает понять единство законов природы

Компьютерный дизайн молекул и материалов помогает понять необходимость изучения математики как фундаментального языка природы

Программа позволит школьникам понять как устроен мир науки о материалах и чем занимаются ученые и инженеры.



Как программа будет использоваться в классе

Учителя будут показывать школьникам как "собирать" молекулы и кристаллы из атомов и демонстрировать "химию" на атомном уровне

Школьники будут узнавать как устроены молекулы и кристаллы, проводить замеры длин связей и величины углов, научатся вводить данные в компьютерную программу (координаты атомов) и связывать математические формулы с физическими и химическими законами.

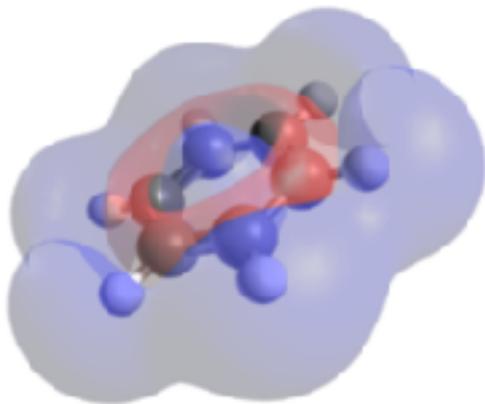
Веб интерфейс позволит школьникам освоить азы программирования и научиться общаться с учеными и инженерами на их языке

Наглядные уроки химии и физики молекул и кристаллов помогут школьникам привить интерес к этим наукам, а также к математике и программированию.



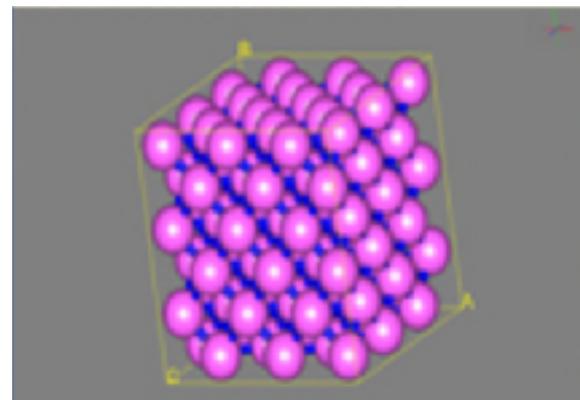
Примеры бесплатных программ по дизайну молекул и материалов

Avogadro



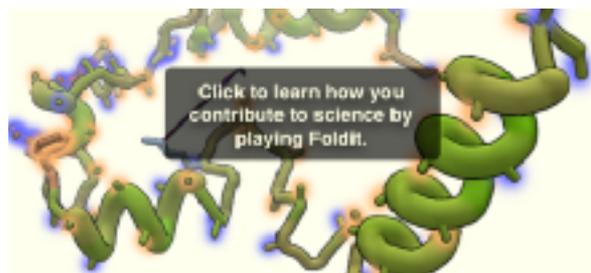
<https://avogadro.cc/>

SageMD



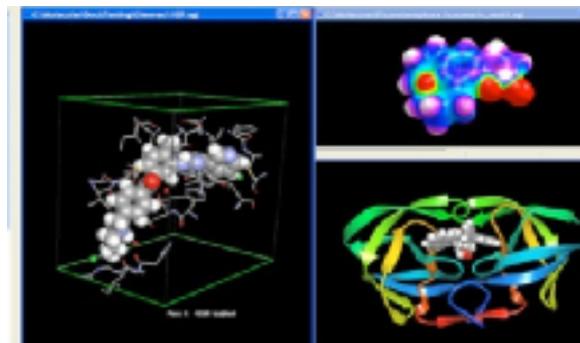
<http://sagemd.com/>

FOLDIT



<https://fold.it/>

ArgusLab



<http://www.arguslab.com/>



Resources and References

ASDN - Educational web site:

<https://asdn.net/>

**Atomic Scale Design for Newbies -
Youtube channel:**

<https://www.youtube.com/channel/UCQZL1UyyBo7HuN-FA286YWA>

**Atomic Scale Design Network -
Facebook group:**

<https://www.facebook.com/groups/atomicscaledesign>

My email address:

korkin@nanoandgiga.com

