

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой

**Базовая кафедра физики
твердого тела и нанотехнологий
(Б-ФТТН_ИИФР)**

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий ОП ВО

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

**Базовая кафедра физики твердого
тела и нанотехнологий (Б-
ФТТН_ИИФР)**

наименование кафедры

доцент П.П.Турчин

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
СВОЙСТВ ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

Дисциплина Б1.В.ДВ.04.01 Численное моделирование свойств твердых тел

Направление подготовки / 03.04.02 Физика, программа 03.04.02.02
специальность Физика конденсированного состояния
вещества 2020г

Направленность
(профиль)

Форма обучения

очная

Год набора

2020

Красноярск 2021

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель преподавания дисциплины

Целью изучения дисциплины является подготовка студентов к выполнению задач практического моделирования при разработке новых кристаллических материалов и улучшения функциональных свойств используемых материалов.

1.2 Задачи изучения дисциплины

Основной задачей дисциплины является получение научных знаний, определяющих пути, способы моделирования кристаллических структур для решения задач создания новых материалов с необходимыми функциональными свойствами, улучшения свойств используемых материалов, прогнозирования свойств материалов по исходным данным.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

ПК-1: способностью самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта	
Уровень 1	способы моделирования кристаллических структур для решения задач создания новых материалов с необходимыми функциональными свойствами
Уровень 1	применять численное моделирование свойств твердых тел к физическим проблемам
Уровень 1	способностью решать задачи научных исследований с помощью информационных технологий

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Обучение строится на основе курсов:

Физика квазикристаллов и гетероструктур
Физика полупроводников и диэлектриков
Физика реального кристалла
Квантовая теория твердого тела
Структурные исследования

Фазовые переходы

Теория групп

Последующие для изучения дисциплины:

Научно-исследовательский семинар

НИР

Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной
квалификационной работы

Преддипломная практика

1.5 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	Семестр
		3
Общая трудоемкость дисциплины	2 (72)	2 (72)
Контактная работа с преподавателем:	0,67 (24)	0,67 (24)
занятия лекционного типа	0,22 (8)	0,22 (8)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	0,44 (16)	0,44 (16)
практикумы		
лабораторные работы		
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
Самостоятельная работа обучающихся:	1,33 (48)	1,33 (48)
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
Промежуточная аттестация (Зачёт)		

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1	Приложение численного моделирования свойств твердых тел к физическим проблемам	8	16	0	48	ПК-1
Всего		8	16	0	48	

3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Приложение численного моделирования свойств твердых тел к физическим проблемам	8	0	0
Всего			8	0	0

3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Моделирование фазового перехода в двухмерной модели Изинга методом Монте-Карло	2	0	0

2	1	Расчет постоянной Маделунга для выбранного кристалла	2	0	0
3	1	Расчет полной энергии кристалла с использованием готового пакета программ первопринципных вычислений	2	0	0
4	1	Получение дисперсионных зависимостей для моноатомного кристалла с ГЦК решеткой	2	0	0
5	1	Вычисление частот колебаний кристаллической решетки реального кристалла с использованием готового пакета программ первопринципных вычислений	2	0	0
6	1	Классификация полученных частот колебаний по неприводимым представлениям	2	0	0
7	1	Построение фононного спектра кристалла	2	0	0
8	1	Расчет плотности фононных состояний кристалла	1	0	0
9	1	Получение температурной зависимости решеточной теплоемкости кристалла	1	0	0
Всего			16	0	0

3.4 Лабораторные занятия

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
Всего					

4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	Николаев С. В.	Численные методы и математическое моделирование: учеб.-метод. пособие для лаб. практикума и самостоят. работы [для студентов спец. 140301.65 «Физика конденсированного состояния вещества»]	Красноярск: СФУ, 2012

5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

6.1. Основная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	Самарский А. А.	Введение в численные методы: учебное пособие для вузов	Москва: Лань, 2009
Л1.2	Рабе К. М., Ан Ч. Г., Трискон Ж.-М., Струков Б. А., Лебедев А. И.	Физика сегнетоэлектриков: современный взгляд	Москва: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2011
Л1.3	Кашурников В. А., Красавин А. В.	Численные методы квантовой статистики: монография	Москва: Физматлит, 2010
Л1.4	Вержбицкий В. М.	Численные методы. Математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения: учебное пособие для вузов	Москва: Директ-Медиа, 2013
Л1.5	Вержбицкий В. М.	Численные методы математической физики: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по направлению подготовки 231300 «Прикладная математика»	Москва: Директ-Медиа, 2013
6.2. Дополнительная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год

Л2.1	Акимов Б. А., Александров В. В., Александровский А. Л., Берман И. В., Брандт Н. Б., Струков Б. А.	Физика твердого тела. Физика полупроводников, физика сегнетоэлектриков и диэлектриков, физика низких температур: спецпрактикум	Москва: Изд-во МГУ, 1983
Л2.2	Зализняк В.Е.	Численные методы. Основы научных вычислений: учеб. пособие для бакалавров по спец. (напр.) подг. 010501 (010500.62) "Прикладная математика и информатика"	Москва: Юрайт, 2012
6.3. Методические разработки			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л3.1	Николаев С. В.	Численные методы и математическое моделирование: учеб.-метод. пособие для лаб. практикума и самостоят. работы [для студентов спец. 140301.65 «Физика конденсированного состояния вещества»]	Красноярск: СФУ, 2012

7 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Э1	Сайт Национального открытого университета ИНТУИТ	www.intuit.ru
Э2	Сайт Евразийского открытого института	http://www.eoi.ru

8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Задание на изучение теоретического материала студент получает у преподавателя на лабораторных занятиях. Преподаватель дает ссылку на методическую литературу, которую необходимо использовать при самостоятельном изучении материала.

9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

9.1 Перечень необходимого программного обеспечения

9.1.1	При изучении дисциплины используется программное обеспечение – MatLab R2008 и выше.
-------	---

9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

9.2.1	ИСС не используются.
-------	----------------------

10 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Для осуществления образовательного процесса необходимо:

- практические занятия проводятся в компьютерных классах не менее чем на 12-15 рабочих мест, желательно оснащенных интерактивной доской.