

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.ДВ.02.01 Численное моделирование свойств твердых тел

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

03.04.02 Физика

Направленность (профиль)

03.04.02.02 Физика конденсированного состояния вещества

Форма обучения

очная

Год набора

2022

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили _____

Доцент, М.С.Павловский

должность, инициалы, фамилия

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

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
ПК-1: Способен самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий, а также анализа областей применения результатов, используя актуальную нормативную документацию	
ПК-1.1: Знает научную проблематику и актуальную нормативную документацию своей профессиональной области	научную проблематику в области физики твердого тела
ПК-1.2: Умеет обосновывать перспективы научных исследований	обосновывать перспективы научных исследований
ПК-1.3: Владеет современной аппаратурой и информационными технологиями для применения и внедрения результатов научной деятельности	
ПК-2: Способен использовать новейший российский и зарубежный опыт, знания современных проблем и достижений физики в научно-исследовательской работе	
ПК-2.1: Знает современные проблемы и новейшие достижения в области физики	

ПК-2.2: Умеет применять знания современных проблем и достижений физики в научно-исследовательской	
работе	
ПК-2.3: Владеет навыками и приемами анализа отечественного и зарубежного опыта по тематике исследований	навыками и приемами анализа литературы по тематике исследований

1.4 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)	е
		1
Контактная работа с преподавателем:	1,78 (64)	
занятия лекционного типа	0,89 (32)	
практические занятия	0,89 (32)	
Самостоятельная работа обучающихся:	0,22 (8)	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

		Контактная работа, ак. час.							
№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				Самостоятельная работа, ак. час.	
				Семинары и/или Практические занятия		Лабораторные работы и/или Практикумы			
		Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС
1. Приложение численного моделирования свойств твердых тел к физическим проблемам									
	1. Приложение численного моделирования свойств твердых тел к физическим проблемам	32							
	2. Моделирование фазового перехода в двухмерной модели Изинга методом Монте-Карло			4					
	3. Расчет постоянной Маделунга для выбранного кристалла			4					
	4. Расчет полной энергии кристалла с использованием готового пакета программ первопринципных вычислений			4					
	5. Получение дисперсионных зависимостей для моноатомного кристалла с ГЦК решеткой			4					
	6. Вычисление частот колебаний кристаллической решетки реального кристалла с использованием готового пакета программ первопринципных вычислений			4					

7. Классификация полученных частот колебаний по неприводимым представлениям			4					
8. Построение фононного спектра кристалла			4					
9. Расчет плотности фононных состояний кристалла			2					
10. Получение температурной зависимости решеточной теплоемкости кристалла			2					
11.							8	
12.								
Всего	32		32				8	

4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

4.1 Печатные и электронные издания:

1. Самарский А. А. Введение в численные методы: учебное пособие для вузов(Москва: Лань).
2. Рабе К. М., Ан Ч. Г., Трискон Ж.-М., Струков Б. А., Лебедев А. И. Физика сегнетоэлектриков: современный взгляд(Москва: БИНОМ, Лаборатория знаний).
3. Кашурников В. А., Красавин А. В. Численные методы квантовой статистики: монография(Москва: Физматлит).
4. Вержбицкий В. М. Численные методы. Математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения: учебное пособие для вузов(Москва: Директ-Медиа).
5. Вержбицкий В. М. Численные методы математической физики: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по направлению подготовки 231300 «Прикладная математика»(Москва: Директ-Медиа).
6. 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).
7. 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).
8. 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).

4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):

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

4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

1. ИСС не используются.

5 Фонд оценочных средств

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 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.