

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

**СОГЛАСОВАНО**

Декан ФСТ

С.В. Ананьин

## **Рабочая программа дисциплины**

Код и наименование дисциплины: **Б1.В.ДВ.1.1 «Методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния»**

Код и наименование направления подготовки (специальности): **03.06.01 Физика и астрономия**

Направленность (профиль, специализация): **Физика конденсированного состояния**

Статус дисциплины: **дисциплины (модули) по выбору**

Форма обучения: **очная**

<b>Статус</b>	<b>Должность</b>	<b>И.О. Фамилия</b>
Разработал	доцент	А.В. Попов
Согласовал	Зав. кафедрой «Ф»	С.Л. Кустов
	руководитель направленности (профиля) программы	М.Д. Старостенков

г. Барнаул

# 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код компетенции из УП и этап её формирования	Содержание компетенции	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
		знать	уметь	владеть
ОПК-1	способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	современные методы исследования; процессы, методы поиска, сбора, хранения, обработки, предоставления, распространения информации	использовать современные методы исследования и информационно-коммуникационные технологии	современными методами исследования и информационно-коммуникационными технологиями
ПК-1	готовность применять основные законы образования кристаллических систем и их поведения в условиях внешнего температурного и силового воздействия для решения практических задач в области материаловедения	законы образования кристаллических систем и их поведения в условиях внешнего температурного и силового воздействия	применять основные законы образования кристаллических систем и их поведения в условиях внешнего температурного и силового воздействия для решения практических задач в области материаловедения	законы образования кристаллических систем и их поведения в условиях внешнего температурного и силового воздействия для решения практических задач в области материаловедения методикой использования основных законов образования кристаллических систем и их поведения в условиях внешнего температурного и силового воздействия для решения практических задач в области материаловедения
ПК-2	способность применять основы атомной и квантовой теории строения твердых тел для анализа и прогнозирования свойств получаемых материалов	основы атомной и квантовой теории строения твердых тел	применять основы атомной и квантовой теории строения твердых тел для анализа и прогнозирования свойств получаемых материалов	основами атомной и квантовой теории строения твердых тел для анализа и прогнозирования свойств получаемых материалов
ПК-3	владение основными методами исследования конденсированных тел,	основные методы исследования	проводить физический	основными методами исследования

Код компетенции из УП и этап её формирования	Содержание компетенции	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
		знать	уметь	владеть
	навыками проведения физического эксперимента и работы на современной научной аппаратуре	конденсированных тел	эксперимент и работать на современной научной аппаратуре	конденсированных тел, навыками проведения физического эксперимента и работы на современной научной аппаратуре
ПК-4	владение понятийным аппаратом физики конденсированного состояния и умение осваивать специальную информацию при чтении научно-технической литературы	понятийный аппарат физики конденсированного состояния	осваивать специальную информацию при чтении научно-технической литературы	понятийным аппаратом физики конденсированного состояния при чтении научно-технической литературы

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), предшествующие изучению дисциплины, результаты освоения которых необходимы для освоения данной дисциплины.	Практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности (научно-исследовательская практика), Практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности (педагогическая практика), Физика конденсированного состояния
Дисциплины (практики), для которых результаты освоения данной дисциплины будут необходимы, как входные знания, умения и владения для их изучения.	Подготовка к сдаче и сдача государственного экзамена, Подготовка научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук, Физика конденсированного состояния

## 3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося

Общий объем дисциплины в з.е. /час: 4 / 144

Форма промежуточной аттестации: Зачет

Форма обучения	Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (час)
	Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа	
очная	0	0	18	126	18

- 4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

**Форма обучения: очная**

**Семестр: 6**

**Практические занятия (18ч.)**

**1. Моделирование квантовых систем. {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (8ч.)[2,3,4,5]** Методы численного решения уравнения Шредингера. Моделирование колебаний двухатомной молекулы в квазиклассическом приближении. Оценка энергии основного состояния. Методы описания возбужденных состояний.

**2. Моделирование систем методом молекулярной динамики. {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (10ч.)[1,2,3]** Моделирование функции радиального распределения. Определение температуры плавления по скрытой теплоте плавления. Определение температурного коэффициента линейного расширения металла. Изучение влияния размера металлических наночастиц на их температуру плавления. Определение энергии активации миграции собственного межузельного атома. Дислокации несоответствия на границе раздела двух металлов. Моделирование миграции границы зерен наклона.

**Самостоятельная работа (126ч.)**

**3. Подготовка к практическим занятиям, контрольным работам и зачету. {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (126ч.)[1,2,3,4,5]** Работа с конспектами лекций, учебниками и учебными пособиями.

- 5. Перечень учебно-методического обеспечения самостоятельной работы обучающихся по дисциплине**

Для каждого обучающегося обеспечен индивидуальный неограниченный доступ к электронно-библиотечным системам: Лань, Университетская библиотека он-лайн, электронной библиотеке АлтГТУ и к электронной информационно-образовательной среде:

1. Полетаев Г.М. Компьютерное моделирование в технической физике [Электронный ресурс]: Методические указания к практическим занятиям по

курсу «Компьютерное моделирование в технической физике» для студентов направления 16.03.01 «Техническая физика». – Барнаул: АлтГТУ, 2020. – 46 с. Прямая ссылка: [http://elib.altstu.ru/eum/download/of/Poletaev\\_KMFKS\\_ump.pdf](http://elib.altstu.ru/eum/download/of/Poletaev_KMFKS_ump.pdf)

## **6. Перечень учебной литературы**

### **6.1. Основная литература**

2. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург : Лань, 2010. — 384 с. — ISBN 978-5-8114-1032-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/156> (дата обращения: 28.01.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

3. Прудников, В.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования : учебное пособие / В.В. Прудников, А.Н. Вакилов, П.В. Прудников. – Москва : Физматлит, 2009. – 224 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68374> (дата обращения: 28.01.2021). – ISBN 978-5-9221-0961-1. – Текст : электронный.

### **6.2. Дополнительная литература**

4. Поршневу, С. В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB : учебное пособие / С. В. Поршневу. — 2-е изд., испр. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 736 с. — ISBN 978-5-8114-1063-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/650> (дата обращения: 28.01.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

5. Нанобиотехнологии : учебное пособие / А. М. Абатурова, Д. В. Багров, А. А. Байжуманов, А. П. Бонарцев ; под редакцией А. Б. Рубина. — 4-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 403 с. — ISBN 978-5-00101-728-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/135508> (дата обращения: 28.01.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

## **7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины**

6. [http://www.ph4s.ru/books\\_phys.html](http://www.ph4s.ru/books_phys.html)

## **8. Фонд оценочных материалов для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации**

Содержание промежуточной аттестации раскрывается в комплекте контролирующих материалов, предназначенных для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, которые хранятся на

кафедре-разработчике РПД в печатном виде и в ЭИОС.

Фонд оценочных материалов (ФОМ) по дисциплине представлен в приложении А.

## **9. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем**

Для успешного освоения дисциплины используются ресурсы электронной информационно-образовательной среды, образовательные интернет-порталы, глобальная компьютерная сеть Интернет. В процессе изучения дисциплины происходит интерактивное взаимодействие обучающегося с преподавателем через личный кабинет студента. Для изучения данной дисциплины профессиональные базы данных и информационно-справочные системы не требуются.

<b>№пп</b>	<b>Используемое программное обеспечение</b>
1	MATLAB R2010b
2	LAMMPS Molecular Dynamics Simulator
3	Microsoft Office
4	Windows
5	Chrome

## **10. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

<b>Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы</b>
учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа
учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций
учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации
помещения для самостоятельной работы

Материально-техническое обеспечение и организация образовательного процесса по дисциплине для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с «Положением об обучении инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья».