

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.6.1 «Компьютерные технологии в физике конденсированного состояния»**

Код и наименование направления подготовки (специальности): **16.03.01  
Техническая физика**

Направленность (профиль, специализация): **Физико-химическое материаловедение**

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

Форма обучения: **очная**

<b>Статус</b>	<b>Должность</b>	<b>И.О. Фамилия</b>
Разработал	ведущий научный сотрудник	Г.М. Полетаев
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-2	способностью применять методы математического анализа, моделирования, оптимизации и статистики для решения задач, возникающих в ходе профессиональной деятельности	<p>Основы математического анализа и математического моделирования; методы оптимизации и статистики; принципы построения оптимальных математических моделей и их анализа (МФ); методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния.</p>	<p>Применять методы математического анализа, моделирования, оптимизации и статистики для решения задач, возникающих в ходе профессиональной деятельности; применять методы математического моделирования к решению научно-технических задач (МФ); применять методы компьютерного моделирования при решении задач физики конденсированного состояния на практике.</p>	<p>Техникой основных математических действий, преобразований и вычислений; методами компьютерного моделирования для решения задач, возникающих в ходе профессиональной деятельности; навыками анализа и оптимизации математических моделей (МФ).</p>
ОПК-3	способностью к теоретическим и экспериментальным исследованиям в избранной области технической физики, готовностью учитывать современные тенденции развития технической физики в своей профессиональной деятельности	<p>Основные законы и модели классической и современной физики; возможности и области применения физико-технического оборудования для проведения исследований в том числе; задачи и содержание основных этапов технологической подготовки производства; структуру нормативного обеспечения машиностроительного производства; методы теоретических и экспериментальных исследований в</p>	<p>Применять законы физики в своей профессиональной деятельности; проводить исследования в избранной области, учитывая современные тенденции развития технической физики; осуществлять выбор оборудования и методик для решения конкретных задач; эксплуатировать современную физическую аппаратуру и оборудование; использовать методы математического</p>	<p>Навыками теоретического и экспериментального исследования; навыками проведения эксперимента и обработки его результатов; навыками применения методов математического исследования физико-технических процессов систем.</p>

Код компетенции из УП и этап её формирования	Содержание компетенции	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
		знать	уметь	владеть
		физике и материаловедении; методы математического исследования физико-технических процессов и систем.	исследования физико-технических процессов систем; использовать методы теоретического и экспериментального исследования для решения научно-технических задач.	
ПК-10	способностью применять современные информационные технологии, пакеты прикладных программ, сетевые компьютерные технологии и базы данных в предметной области для расчета технологических параметров	Современные информационные технологии; основные пакеты прикладных программ, базы данных в предметной области физики и материаловедения; в том числе современные информационные, сетевые технологии и базы данных для моделирования технологических параметров.	Уверенно работать на компьютере; использовать современные информационные технологии, пакеты прикладных программ в профессиональной деятельности; в том числе использовать информационные, сетевые технологии и базы данных для моделирования технологических параметров.	Навыками представления и обработки информации с помощью пакетов прикладных программ; в том числе навыками расчета технологических параметров с помощью пакетов прикладных программ, сетевых компьютерных технологий, баз данных.

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), предшествующие изучению дисциплины, результаты освоения которых необходимы для освоения данной дисциплины.	Математика, Математические методы обработки данных, Физика, Физика конденсированного состояния
Дисциплины (практики), для которых результаты освоения данной дисциплины будут необходимы, как входные знания, умения и владения для их изучения.	Преддипломная практика

## 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: 3 / 108

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	17	34	0	57	60

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

**Форма обучения: очная**

**Семестр: 7**

**Лекционные занятия (17ч.)**

- 1. Лекция №1. Теоретические и экспериментальные исследования в физике конденсированного состояния. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (2ч.)[1,2,3,4,5] Нанотехнологии и современные методы исследования атомной структуры в физике конденсированного состояния.**
- 2. Лекция №2. Современные информационные технологии и методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (2ч.)[1,2,3,4,5] Основные методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния.**
- 3. Лекция №3. Методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (2ч.)[1,2,3,4,5] Потенциалы межатомного взаимодействия.**
- 4. Лекция №4. Методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (2ч.)[1,2,3,4,5] Метод минимизации энергии (метод вариационной квазистатики, метод молекулярной статики).**
- 5. Лекция №5. Методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (2ч.)[1,2,3,4,5] Метод молекулярной динамики (МД).**
- 6. Лекция №6. Методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (2ч.)[1,2,3,4,5] Основные проблемы компьютерного моделирования методом МД. Моделирование различных термодинамических ансамблей.**
- 7. Лекция №7. Методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (2ч.)[1,2,3,4,5] Метод Монте-Карло.**
- 8. Лекция №8. Методы компьютерного моделирования в физике**

**конденсированного состояния. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (3ч.)[1,2,3,4,5]** Основные характеристики и визуализаторы атомной структуры. Основные этапы проведения исследований методом компьютерного моделирования.

#### **Лабораторные работы (34ч.)**

- 1. Лабораторная работа №1(4ч.)[1,2,3,4,5]** Изучение функции радиального распределения (парной корреляционной функции) в зависимости от параметра кристаллической решетки и температуры.
- 2. Лабораторная работа №2(4ч.)[1,2,3,4,5]** Способы регистрации плавления кристаллической структуры в модели молекулярной динамики.
- 3. Лабораторная работа №3(4ч.)[1,2,3,4,5]** Исследование теплового расширения с помощью метода молекулярной динамики.
- 4. Коллоквиум(2ч.)[1,2,3,4,5]** Коллоквиум №1
- 5. Лабораторная работа №4(6ч.)[1,2,3,4,5]** Исследование зависимости коэффициента диффузии от температуры. Проверка справедливости уравнения Аррениуса. Определение энергии активации диффузии.
- 6. Лабораторная работа №5(4ч.)[1,2,3,4,5]** Определение энергии активации миграции собственного межузельного атома. Проверка справедливости уравнения Аррениуса для коэффициента самодиффузии.
- 7. Лабораторная работа №6(4ч.)[1,2,3,4,5]** Исследование влияния температуры переохлаждения на скорость движения фронта кристаллизации.
- 8. Лабораторная работа №7(4ч.)[1,2,3,4,5]** Исследование влияния температуры на модуль упругости и теоретическую прочность кристалла.
- 9. Коллоквиум(2ч.)[1,2,3,4,5]** Коллоквиум №2

#### **Самостоятельная работа (57ч.)**

- 10. Проработка теоретического материала {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (15ч.)[1,2,3,4,5,6]**  
Работа с конспектом лекций, учебником, учебными пособиями, другими источниками.
- 11. Подготовка к лабораторным работам(34ч.)[1,2,3,4,5,6]**
- 12. Подготовка к зачёту, сдача зачёта(8ч.)[1,2,3,4,5,6]**

#### **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. Губина Т.Н., Тарова И.Н. Учебно-методическое пособие по дисциплине «Компьютерное моделирование» : учебное пособие. - Елец: ЕГУ, 2004. - 155 с. Доступ из ЭБС «Университетская библиотека online». Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=272142>

## **6. Перечень учебной литературы**

### **6.1. Основная литература**

2. Старостин В.В. Материалы и методы нанотехнологий. – М.: Лаборатория знаний, 2015. – 434 с. – Доступ из ЭБС «Лань». Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/66203>

3. Рыжонков Д.И., Лёвина В.В., Дзидзигури Э.Л. Наноматериалы: учебное пособие. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2017. – 368 с. – Доступ из ЭБС «Лань». Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94117>

### **6.2. Дополнительная литература**

4. Ибрагимов И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем. - СПб.: Лань, 2010. - 376 с. – Доступ из ЭБС «Лань». Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/156>

5. Голубева Н.В. Математическое моделирование систем и процессов. - СПб.: Лань, 2016. - 192 с. – Доступ из ЭБС «Лань». Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/76825>

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

6. Официальный сайт «Роснано» [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.rusnano.com>

## **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.

<b>№пп</b>	<b>Используемое программное обеспечение</b>
1	Microsoft Office
2	Molecular Dynamics Research(MDR)
3	LAMMPS Molecular Dynamics Simulator
4	LibreOffice
5	Windows
6	Антивирус Kaspersky

<b>№пп</b>	<b>Используемые профессиональные базы данных и информационные справочные системы</b>
1	Бесплатная электронная библиотека онлайн "Единое окно к образовательным ресурсам" для студентов и преподавателей; каталог ссылок на образовательные интернет-ресурсы ( <a href="http://Window.edu.ru">http://Window.edu.ru</a> )
2	Национальная электронная библиотека (НЭБ) — свободный доступ читателей к фондам российских библиотек. Содержит коллекции оцифрованных документов (как открытого доступа, так и ограниченных авторским правом), а также каталог изданий, хранящихся в библиотеках России. ( <a href="http://нэб.рф/">http://нэб.рф/</a> )

#### **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 лекционного типа
учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации
помещения для самостоятельной работы
лаборатории
учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций

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».