

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.2.2 «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: **элективные дисциплины (модули)**

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 индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Содержание компетенции	Индикатор	Содержание индикатора
ПК-1	Способен к поиску научно-технической информации в избранной области технической физики и постановке задачи исследований	ПК-1.1	Выявляет сущность научно-технических проблем и осуществляет постановку задачи с применением физико-математического аппарата
		ПК-1.2	Применяет методы поиска и изучения научно-технической информации, отечественного и зарубежного опыта в избранной области технической физики
ПК-4	Способен применять физико-математический аппарат, теоретические, расчетные и экспериментальные методы исследований, методы компьютерного моделирования в профессиональной деятельности	ПК-4.2	Применяет теоретические, расчетные и экспериментальные методы исследований для решения задач в области технической физики
		ПК-4.3	Использует методы компьютерного моделирования для решения задач профессиональной деятельности

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), предшествующие изучению дисциплины, результаты освоения которых необходимы для освоения данной дисциплины.	Физика, Физика конденсированного состояния
Дисциплины (практики), для которых результаты освоения данной дисциплины будут необходимы, как входные знания, умения и владения для их изучения.	Выпускная квалификационная работа, 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	20	0	20	68	50

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

**Форма обучения: очная**

**Семестр: 8**

**Лекционные занятия (20ч.)**

**1. Поиск и изучение научно-технической информации в избранной области технической физики. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (4ч.)[1,2,3,4,5]** Современные методы исследования атомной структуры материалов. Нанотехнологии и наноматериалы. Примеры использования современных наноматериалов.

**2. Методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния и материаловедении. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (4ч.)[1,2,3,4,5,6]** Компьютерные технологии в физике конденсированного состояния и материаловедении. История применения компьютерной техники для исследований в физике конденсированного состояния. Современные примеры использования компьютерных технологий в материаловедении и физике конденсированного состояния.

**3. Методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния и материаловедении. {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (8ч.)[1,2,3,4,5]** Современные методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния: молекулярная динамика, метод минимизации энергии, метод Монте-Карло. Преимущества и недостатки методов. Примеры современных научных работ, выполненных с помощью данных методов.

**4. Методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния и материаловедении. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (4ч.)[1,2,3,4,5]** Рассмотрение прикладных программ для моделирования материалов на атомном уровне: LAMMPS, MDR. Разбор спектра решаемых задач и возможностей программ. Используемые потенциалы и визуализаторы.

**Практические занятия (20ч.)**

**1. Практическое занятие №1 {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (2ч.)[1,2,3,4,5]** Определение типа и параметра кристаллической решетки металла с помощью функции радиального распределения (парной корреляционной функции).

**2. Практическое занятие №2 {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (2ч.)[1,2,3,4,5]** Определение температуры плавления в методе молекулярной динамики: по скачку средней

потенциальной энергии, по скорости движения фронта кристаллизации-плавления.

**3. Практическое занятие №3,4 {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (4ч.)[1,2,3,4,5]** Определение температурного коэффициента линейного расширения металла методом молекулярной динамики.

**4. Практическое занятие №5,6 {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (4ч.)[1,2,3,4,5]** Определение влияния температуры переохлаждения на скорость движения фронта кристаллизации.

**5. Практическое занятие №7,8 {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (4ч.)[1,2,3,4,5]** Определение энергии активации миграции собственного межузельного атома. Проверка справедливости уравнения Аррениуса для коэффициента самодиффузии.

**6. Практическое занятие №9,10 {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (4ч.)[1,2,3,4,5]** Определение влияния температуры на модуль упругости и теоретическую прочность кристалла.

#### **Самостоятельная работа (68ч.)**

**16. Проработка теоретического материала, подготовка к практическим занятиям {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (26ч.)[1,2,3,4,5,6]**

**17. Подготовка к контрольным опросам {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (16ч.)[1,2,3,4,5,6]**

**18. Подготовка и выполнение практических заданий {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (16ч.)[1,2,3,4,5,6]**

**19. Подготовка к зачету {с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий} (10ч.)[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. Полетаев Г.М. Компьютерное моделирование в технической физике [Электронный ресурс]: Учебно-методическое пособие.— Электрон. дан.— Барнаул: АлтГТУ, 2020.— Режим доступа: [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. Пряхин Е. И., Вологжанина С. А., Петкова А. П., Ганзуленко О. Ю. Наноматериалы и нанотехнологии: учебник для вузов [Электронный ресурс] : учебное пособие. — Электрон. дан. — СПб. : Лань, 2020. — 372 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/149303>

3. Абатурова А. М., Багров Д. В., Байжуманов А. А., Бонарцев А. П. Нанобиотехнологии: практикум [Электронный ресурс] : учебное пособие. — Электрон. дан. — СПб. : Лань, 2020. — 403 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/135508>

### **6.2. Дополнительная литература**

4. Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем [Электронный ресурс] : учебное пособие. — Электрон. дан. — СПб. : Лань, 2010. — 384 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/156>

5. Джардималиева Г. И., Кыдралиева К. А., Метелица А. В., Уфлянд И. Е. Наноматериалы. Свойства и сферы применения: учебник [Электронный ресурс] : учебное пособие. — Электрон. дан. — СПб. : Лань, 2020. — 200 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/140739>

## **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	LAMMPS Molecular Dynamics Simulator
2	LibreOffice
3	Molecular Dynamics Research(MDR)
4	Windows
5	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 учебных занятий
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».