

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по безопасности и общим вопросам

Дата подписания: 30.09.2023 16:41:18

Уникальный программный ключ:

d7a26b9e8ca85e98ac3de2ab454b4659d961f749

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

## Рабочая программа дисциплины (модуля)

# Компьютерное моделирование в физическом материаловедении

Закреплена за подразделением

Кафедра физического материаловедения

Направление подготовки

03.04.02 ФИЗИКА

Профиль

Физика конденсированного состояния

Квалификация

**Магистр**

Форма обучения

**очная**

Общая трудоемкость

**4 ЗЕТ**

Часов по учебному плану

144

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

зачет с оценкой 1

аудиторные занятия

34

самостоятельная работа

110

### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	1 (1.1)		Итого	
	УП	РП	УП	РП
Неделя	18			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	17	17	17	17
Практические	17	17	17	17
Итого ауд.	34	34	34	34
Контактная работа	34	34	34	34
Сам. работа	110	74	110	74
Итого	144	108	144	108

Программу составил(и):

*кфмн, доцент, Жуков Дмитрий Геннадьевич*

Рабочая программа

**Компьютерное моделирование в физическом материаловедении**

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - магистратура Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» по направлению подготовки 03.04.02 ФИЗИКА (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

03.04.02 ФИЗИКА, 03.04.02-МФ3-22-1.plx Физика конденсированного состояния, утвержденного Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" в составе соответствующей ОПОП ВО 22.09.2022, протокол № 8-22

Утверждена в составе ОПОП ВО:

03.04.02 ФИЗИКА, Физика конденсированного состояния, утвержденной Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" 22.09.2022, протокол № 8-22

Рабочая программа одобрена на заседании

**Кафедра физического материаловедения**

Протокол от 11.04.2022 г., №8-04

Руководитель подразделения Савченко Александр Григорьевич

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ**

1.1	Сформировать компетенции, предусмотренные учебным планом, и дать понимание методов математического и компьютерного моделирования процессов, определяющих свойства и применение материалов.
1.2	

**2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

Блок ОП:		Б1.В.ДВ.02
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	
2.2.1	Компьютерные технологии в науке и образовании	
2.2.2	Неравновесные конденсированные системы (II)	
2.2.3	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности. Научно-исследовательская практика	
2.2.4	Системы накопления и хранения электрической энергии	
2.2.5	Экспериментальные методы физики твердого тела	
2.2.6	История и методология физики	
2.2.7	Наночастицы и наноматериалы	
2.2.8	Термодинамическое моделирование химических процессов в многокомпонентных гетерогенных системах	
2.2.9	Электронные свойства неравновесных материалов	
2.2.10	Научно-педагогическая практика	
2.2.11	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы	
2.2.12	Динамика решетки и электрон-фононное взаимодействие в твердых телах	
2.2.13	Дифракционные и спектроскопические методы исследования твердых тел	
2.2.14	Информационно-аналитические системы в материаловедении	
2.2.15	Физика магнитных явлений. Часть 1. Основы магнетизма	
2.2.16	Физика магнитных явлений. Часть 2. Магнетизм веществ	
2.2.17	Физические методы исследований	
2.2.18	Инженерия поверхности	
2.2.19	Радиационная обработка поверхности	
2.2.20	Тонкопленочные материалы	
2.2.21	Физика дифракции	
2.2.22	Экспериментальные методы в физике магнетизма	
2.2.23	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	

**3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ**

**ОПК-3: Способен применять знания в области информационных технологий, использовать современные компьютерные сети, программные продукты и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть "Интернет") для решения задач профессиональной деятельности, проектировании и разработке, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки**

**Знать:**

ОПК-3-31 основные методы моделирования;

**ПК-3: Способен проводить математические расчеты в рамках классических или разрабатываемых новых физических моделей процессов в области физики конденсированного состояния**

**Знать:**

ПК-3-31 основные методы и алгоритмы моделирования материалов и процессов;

**ОПК-1: Способен применять фундаментальные знания в области физики, знания в междисциплинарных областях для решения научно-исследовательских задач, а также владеть основами педагогики, необходимыми для осуществления преподавательской деятельности**

**Знать:**

ОПК-1-31 области применения различных методов моделирования, их преимущества, недостатки и ограничения;

<b>ПК-3: Способен проводить математические расчеты в рамках классических или разрабатываемых новых физических моделей процессов в области физики конденсированного состояния</b>
<b>Уметь:</b>
ПК-3-У1 использовать методы моделирования при прогнозировании и оптимизации технологических процессов и свойств материалов;
<b>ОПК-3: Способен применять знания в области информационных технологий, использовать современные компьютерные сети, программные продукты и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть "Интернет") для решения задач профессиональной деятельности, проектировании и разработке, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-3-У1 применять методы моделирования для анализа структурного состояния металлов и сплавов и способов управления им
<b>ОПК-1: Способен применять фундаментальные знания в области физики, знания в междисциплинарных областях для решения научно-исследовательских задач, а также владеть основами педагогики, необходимыми для осуществления преподавательской деятельности</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-1-У1 обосновывать наиболее вероятные механизмы протекания процессов в различных условиях изготовления и эксплуатации металлов и сплавов в заданных условиях;
<b>ПК-3: Способен проводить математические расчеты в рамках классических или разрабатываемых новых физических моделей процессов в области физики конденсированного состояния</b>
<b>Владеть:</b>
ПК-3-В1 навыками обработки экспериментальных данных и их оценки;
<b>ОПК-1: Способен применять фундаментальные знания в области физики, знания в междисциплинарных областях для решения научно-исследовательских задач, а также владеть основами педагогики, необходимыми для осуществления преподавательской деятельности</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-1-В2 навыками расчетов температур кинетики фазовых превращений, пластической и упругой деформации, в том числе и в нелинейной области, кинетики упорядочения и разупорядочения, распада твердых растворов, расчета диаграмм фазового равновесия;
ОПК-1-В1 навыком использования моделей явлений для прогнозирования поведения материалов при технологических процессах их производства;
<b>ОПК-3: Способен применять знания в области информационных технологий, использовать современные компьютерные сети, программные продукты и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть "Интернет") для решения задач профессиональной деятельности, проектировании и разработке, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-3-В1 применять методы моделирования для анализа структурного состояния металлов и сплавов и способов управления им

#### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Формируемые индикаторы компетенций	Литература и эл. ресурсы	Примечание	КМ	Выполняемые работы
	<b>Раздел 1. Молекулярная динамика</b>							
1.1	Методы численного интегрирования уравнений движения, используемые в молекулярной динамике: алгоритм Верле в скоростной форме, метод Бимана-Шофилда. /Лек/	1	2	ОПК-1-31 ОПК-3-31 ПК-3-31	Л1.2 Л1.4Л2.2 Л2.3Л3.1			
1.2	Погрешности методов численного интегрирования, их проявление и способы минимизации и учета. /Лек/	1	2	ОПК-1-31 ОПК-3-31 ПК-3-31	Л1.2 Л1.4Л2.2Л3.1			

1.3	Потенциалы межатомного взаимодействия: кубический, Ленарда-Джонса, Ми, понятие о потенциале погруженного атома. Простейшая двухатомная модель твердого тела, теоретические оценки физических и механических свойств, постоянная Грюнайзена, ангармонический осциллятор /Лек/	1	2	ОПК-1-31 ОПК-3-31 ПК-3-31	Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3. 1			
1.4	Бинарная корреляционная функция. Осциллирующие потенциалы. Методы ускорения расчетов и совершенствования модели. /Пр/	1	2	ОПК-1-У1 ОПК-3-У1	Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3. 1			P1
1.5	Начальные и краевые условия в молекулярной динамике. Фазовые превращения в молекулярной динамике: плавление, испарение, мартенситное превращение /Пр/	1	2	ПК-3-У1	Л1.6Л2.2Л3. 1			P2
1.6	Сравнение методов численного интегрирования по разным критериям и влияние шага интегрирования на сохранение энергии в модели нелинейного осциллятора; сравнение результатов использования межатомных потенциалов различного типа /Пр/	1	2	ОПК-3-У1	Л1.1 Л1.2 Л1.6Л2.2Л3. 1			P3
1.7	Использование бинарной корреляционной функции для изучения фазовых превращений; измерение скорости скольжения дислокаций и мартенситного превращения /Пр/	1	2	ОПК-1-У1	Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3. 1			P7
1.8	Подготовка домашнего задания 1 /Ср/	1	8	ОПК-1-В1 ОПК-1-В2 ОПК-3-В1 ПК-3-В1	Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3. 1 Э2			
	<b>Раздел 2. Методы Монте-Карло</b>							
2.1	Метод Монте-Карло и алгоритм Метрополиса для моделирования атомных перемещений. /Лек/	1	2	ОПК-1-31 ОПК-3-31 ПК-3-31	Л1.3Л2.1Л3. 1 Э1			
2.2	Клеточные автоматы и модель решеточного «газа». Моделирование диффузии в сплавах /Лек/	1	2	ОПК-1-31 ОПК-3-31 ПК-3-31	Л1.5Л2.2Л3. 1			
2.3	Упорядочение твердых растворов и распад твердых растворов. Коалесценция. Адсорбция и образование пленок /Лек/	1	2	ОПК-1-31 ОПК-3-31 ПК-3-31	Л1.1Л2.2Л3. 1			

2.4	Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа» /Пр/	1	2	ОПК-1-У1	Л1.1Л2.2Л3.1			Р8
2.5	Определение кинетики атомного упорядочения и расслоения твердых растворов в модели решеточного «газа» /Пр/	1	2	ОПК-1-У1 ПК-3-У1	Л1.1Л2.2Л3.1			
2.6	Подготовка домашнего задания 2 /Ср/	1	8	ОПК-1-В1 ОПК-1-В2 ОПК-3-В1 ПК-3-В1	Л1.3 Л1.5Л2.2Л3.1 Э2			
<b>Раздел 3. Геометрические фазовые переходы, перколяция и фракталы</b>								
3.1	Модель агрегации, ограниченной диффузией. Понятие фрактала. Модель перколяции как геометрический фазовый переход. /Лек/	1	2	ОПК-1-31 ОПК-3-31 ПК-3-31	Л1.7Л2.2Л3.1			
3.2	Измерение параметров геометрических фазовых переходов в модели перколяции /Пр/	1	2	ОПК-1-У1 ПК-3-У1	Л1.7Л2.2Л3.1			Р9
<b>Раздел 4. Моделирование диаграмм фазового равновесия</b>								
4.1	Принципы и методы моделирования диаграмм фазового равновесия. Модели твердых и жидких растворов /Лек/	1	3	ОПК-1-31 ОПК-3-31 ПК-3-31	Л1.6Л2.2Л3.1			
4.2	Алгоритм определения критических точек диаграмм фазового равновесия /Пр/	1	1	ОПК-1-У1 ПК-3-У1	Л1.6Л2.2Л3.1			Р10
4.3	Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа» /Пр/	1	2	ОПК-3-У1 ПК-3-У1	Л1.3Л2.2Л3.1			Р11
4.4	Выполнение курсовой работы /Ср/	1	24	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-1-В2 ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ПК-3-31 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.3 Л1.5Л2.2Л3.1 Э1 Э2			
4.5	подготовка к экзамену /Ср/	1	34	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-1-В2 ПК-3-31 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.1 Э1 Э2		КМ1	

<b>5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки</b>			
Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
КМ1	Экзамен	ОПК-3-31;ОПК-3-У1;ОПК-1-31;ОПК-3-В1;ПК-3-В1;ПК-3-У1;ПК-3-31;ОПК-1-В2;ОПК-1-В1;ОПК-1-У1	<p>Как в модели молекулярной динамики построить зависимость (распределение) скоростей атомов <math>n(v)</math>, где <math>n</math> – доля атомов, имеющих скорость в интервале от <math>v</math> до <math>v+dv</math>. Изучить влияние температуры на кривые распределения.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики "измерить" коэффициент линейного расширения при низких температурах и при температуре близкой к температуре плавления. Ответ дать как в приведенных единицах, так и в обычной системе единиц измерения для типичного металла.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики "измерить" скорость движения одиночной дислокации. Ответ дать как в приведенных единицах, так и в обычной системе единиц измерения для типичного металла. Изучить влияние температуры на эту скорость.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций одного знака, находящихся в одной плоскости скольжения.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций противоположного знака, находящихся в одной плоскости скольжения.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций одного знака, находящихся в разных плоскостях скольжения.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций противоположного знака, находящихся в разных плоскостях скольжения.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики установить значения параметров межатомного потенциала, при которых 2-мерная решетка устойчива в "треугольной" и "квадратной" сингонии.</p> <p>Как в модели решеточного газа построить зависимость равновесной концентрации вакансий от температуры.</p> <p>Как в модели решеточного газа построить зависимость плотности газа, находящегося в равновесии с конденсированной фазой, от температуры.</p> <p>Как в модели решеточного газа определить условия, при которых двухфазная смесь самопроизвольно превращается в твердый раствор двух компонентов.</p> <p>Как в модели решеточного газа определить условия, при которых твердый раствор двух компонентов самопроизвольно превращается в двухфазную смесь.</p> <p>Как в модели решеточного газа определить условия, при которых разупорядоченный твердый раствор двух компонентов самопроизвольно упорядочивается.</p> <p>Как в модели решеточного газа предложить критерий конденсации/сублимации и определить соответствующую температуру.</p> <p>Как в модели решеточного газа определить условия, при которых упорядоченный твердый раствор двух компонентов самопроизвольно разупорядочивается.</p> <p>Как в модели решеточного газа определить условия, при которых устойчиво следующее фазовое состояние: газ из компонента В и кристалл на основе компонента А, покрытый слоем адсорбированных атомов В.</p>
<b>5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)</b>			
Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы

P1	Бинарная корреляционная функция. Осциллирующие потенциалы. Методы ускорения расчетов и совершенствования модели.	ОПК-3-31;ОПК-1-31;ПК-3-31	Бинарная корреляционная функция. Осциллирующие потенциалы. Методы ускорения расчетов и совершенствования модели.
P2	Начальные и краевые условия в молекулярной динамике. Фазовые превращения в молекулярной динамике: плавление, испарение, мартенситное превращение	ОПК-3-31;ОПК-3-У1;ОПК-1-У1;ОПК-1-В2	Начальные и краевые условия в молекулярной динамике. Фазовые превращения в молекулярной динамике: плавление, испарение, мартенситное превращение
P3	Сравнение методов численного интегрирования по разным критериям и влияние шага интегрирования на сохранение энергии в модели нелинейного осциллятора; сравнение результатов использования межатомных потенциалов различного типа	ПК-3-В1;ПК-3-У1;ОПК-1-В1;ОПК-3-В1	Сравнение методов численного интегрирования по разным критериям и влияние шага интегрирования на сохранение энергии в модели нелинейного осциллятора; сравнение результатов использования межатомных потенциалов различного типа
P4	ДЗ 1 В модели "Осциллятор" изучить зависимость теплоемкости и коэффициента термического расширения от температуры для потенциала m-n с (индивидуально) заданными параметрами и сравнить их с аналогичными зависимостями для гармонического потенциала. Учесть погрешности интегрирования при различных температурах. (Варианты выдаются индивидуально)	ОПК-1-В1;ПК-3-31;ОПК-3-В1	В модели "Осциллятор" изучить зависимость теплоемкости и коэффициента термического расширения от температуры для потенциала m-n с (индивидуально) заданными параметрами и сравнить их с аналогичными зависимостями для гармонического потенциала. Учесть погрешности интегрирования при различных температурах. (Варианты выдаются индивидуально)



P5	ДЗ 2 В модели "Решеточный газ ( $z=4$ )" изучить поведение системы при ее переходе из исходного состояния неупорядоченного твердого раствора в стабильное состояние при различных температурах. Изучить - это значит понять почему и какие качественные изменения происходят в системе и придумать как их можно описать количественно, то есть какие зависимости можно и нужно измерять и анализировать. (Варианты выдаются индивидуально)	ПК-3-У1;ОПК-3-У1	В модели "Решеточный газ ( $z=4$ )" изучить поведение системы при ее переходе из исходного состояния неупорядоченного твердого раствора в стабильное состояние при различных температурах. Изучить - это значит понять почему и какие качественные изменения происходят в системе и придумать как их можно описать количественно, то есть какие зависимости можно и нужно измерять и анализировать. (Варианты выдаются индивидуально)
P6	Курсовая работа. Темы приведены в приложении	ОПК-3-31;ОПК-3-В1;ОПК-1-У1;ОПК-1-В2;ПК-3-31;ПК-3-У1;ПК-3-В1;ОПК-1-В1;ОПК-3-У1;ОПК-1-31	Курсовая работа.
P7	Использование бинарной корреляционной функции для изучения фазовых превращений; измерение скорости скольжения дислокаций и мартенситного превращения	ПК-3-31;ОПК-1-У1	Использование бинарной корреляционной функции для изучения фазовых превращений; измерение скорости скольжения дислокаций и мартенситного превращения
P8	Определение температурной зависимость концентрации вакансий в модели решеточного «газа»	ПК-3-31;ОПК-1-31;ОПК-3-В1	Определение температурной зависимость концентрации вакансий в модели решеточного «газа»
P9	Измерение параметров геометрических фазовых переходов в модели перколяции	ОПК-3-31;ПК-3-31;ПК-3-У1	Измерение параметров геометрических фазовых переходов в модели перколяции
P10	Алгоритм определения критических точек диаграмм фазового равновесия	ПК-3-У1;ОПК-1-31	Алгоритм определения критических точек диаграмм фазового равновесия

P11	Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа»	ОПК-1-В2;ОПК-3-В1	Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа»
P12	Определение кинетики атомного упорядочения и расслоения твердых растворов в модели решеточного «газа»	ОПК-3-У1;ОПК-1-У1	Определение кинетики атомного упорядочения и расслоения твердых растворов в модели решеточного «газа»

### 5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (описание билетов, тестов и т.п.)

#### ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЕ ВОПРОСЫ

к письменному экзамену по курсу "Компьютерное моделирование в физическом материаловедении"

#### Вопрос 1:

1. Как в модели молекулярной динамики построить зависимость (распределение) скоростей атомов  $n(v)$ , где  $n$  – доля атомов, имеющих скорость в интервале от  $v$  до  $v+dv$ . Изучить влияние температуры на кривые распределения.
2. Как в модели молекулярной динамики "измерить" коэффициент линейного расширения при низких температурах и при температуре близкой к температуре плавления. Ответ дать как в приведенных единицах, так и в обычной системе единиц измерения для типичного металла.
3. Как в модели молекулярной динамики "измерить" скорость движения одиночной дислокации. Ответ дать как в приведенных единицах, так и в обычной системе единиц измерения для типичного металла. Изучить влияние температуры на эту скорость.
4. Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций одного знака, находящихся в одной плоскости скольжения.
5. Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций противоположного знака, находящихся в одной плоскости скольжения.
6. Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций одного знака, находящихся в разных плоскостях скольжения.
7. Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций противоположного знака, находящихся в разных плоскостях скольжения.
8. Как в модели молекулярной динамики установить значения параметров межатомного потенциала, при которых 2-мерная решетка устойчива в "треугольной" и "квадратной" сингонии.

#### Вопрос 2:

1. Как в модели решеточного газа построить зависимость равновесной концентрации вакансий от температуры.
2. Как в модели решеточного газа построить зависимость плотности газа, находящегося в равновесии с конденсированной фазой, от температуры.
3. Как в модели решеточного газа определить условия, при которых двухфазная смесь самопроизвольно превращается в твердый раствор двух компонентов.
4. Как в модели решеточного газа определить условия, при которых твердый раствор двух компонентов самопроизвольно превращается в двухфазную смесь.
5. Как в модели решеточного газа определить условия, при которых разупорядоченный твердый раствор двух компонентов самопроизвольно упорядочивается.
6. Как в модели решеточного газа предложить критерий конденсации/сублимации и определить соответствующую температуру.
7. Как в модели решеточного газа определить условия, при которых упорядоченный твердый раствор двух компонентов самопроизвольно разупорядочивается.
8. Как в модели решеточного газа определить условия, при которых устойчиво следующее фазовое состояние: газ из компонента В и кристалл на основе компонента А, покрытый слоем адсорбированных атомов В.

Пример экзаменационного билета приведен в приложении к данной программе.

**5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)**

По курсу предусмотрен экзамен.

Оценка «отлично» - обучающийся показывает глубокие, исчерпывающие знания в объеме пройденной программы, уверенно действует по применению полученных знаний на практике, грамотно и логически стройно излагает материал при ответе, умеет формулировать выводы из изложенного теоретического материала, знает дополнительно рекомендованную литературу.

Оценка «хорошо» - обучающийся показывает твердые и достаточно полные знания в объеме пройденной программы, допускает незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, правильно действует по применению знаний на практике, четко излагает материал.

Оценка «удовлетворительно» - обучающийся показывает знания в объеме пройденной программы, ответы излагает хотя и с ошибками, но уверенно исправляемыми после дополнительных и наводящих вопросов, правильно действует по применению знаний на практике;

Оценка «неудовлетворительно» - обучающийся допускает грубые ошибки в ответе, не понимает сущности излагаемого вопроса, не умеет применять знания на практике, дает неполные ответы на дополнительные и наводящие вопросы.

Оценка «не явка» – обучающийся на экзамен не явился.

**6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ****6.1. Рекомендуемая литература****6.1.1. Основная литература**

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Звонарев С. В., Кортов В. С., Штанг Т. В.	Моделирование структуры и свойств наносистем: учебно-методическое пособие	Электронная библиотека	Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2014
Л1.2	Данилов Н. Н.	Математическое моделирование: учебное пособие	Электронная библиотека	Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2014
Л1.3	Соболь И. М., Пирогова Г. Я.	Численные методы Монте-Карло	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1973
Л1.4	Иванов В. В., Кузьмина О. В.	Математическое моделирование: учебно-методическое пособие	Электронная библиотека	Йошкар-Ола: Поволжский государственный технологический университет, 2016
Л1.5	Осипов Ю. В., Славин М. Б.	Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур. Диффузия: учеб. пособие	Библиотека МИСиС	М.: Изд-во МИСиС, 2011
Л1.6	Юрчук С. Ю.	Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур. Моделирование наносистем методами молекулярной динамики: курс лекций	Библиотека МИСиС	М.: Изд-во МИСиС, 2013
Л1.7	Шихеева В. В.	Фрактальная геометрия. Детерминированные фракталы: учебник	Электронная библиотека	М.: Изд-во МИСиС, 2019

**6.1.2. Дополнительная литература**

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Соболь И. М.	Метод Монте-Карло	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1968
Л2.2	Мак-Лоун Р. Р., Крэггс Дж. У., Нобл Б., др., Эндрюс Дж., Мак-Лоун Р. Р.	Математическое моделирование	Библиотека МИСиС	М.: Мир, 1979

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.3	Розин К. М., Закутайлов К. В.	Моделирование физических и технологических процессов: учеб. пособие	Электронная библиотека	М.: Изд-во МИСиС, 2009

### 6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1	Губина Т. Н., Тарова И. Н.	Учебно-методическое пособие по дисциплине «Компьютерное моделирование»: учебное пособие	Электронная библиотека	Елец: Елецкий государственный университет им. И. А. Бунина, 2004

### 6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Э1	Dissemination of IT for the Promotion of Materials Science (DoITPoMS). Solid Solutions	<a href="https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/solid-solutions/index.php">https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/solid-solutions/index.php</a>
Э2	Хранилище документации Майкрософт для пользователей, разработчиков и ИТ-специалистов	<a href="https://docs.microsoft.com/ru-ru/">https://docs.microsoft.com/ru-ru/</a>

### 6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	Win Pro 10 32-bit/64-bit
П.2	ESET NOD32 Antivirus
П.3	Microsoft Office

### 6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

И.1	Полнотекстовые российские научные журналы и статьи:
И.2	— Научная электронная библиотека eLIBRARY <a href="https://elibrary.ru/">https://elibrary.ru/</a>
И.3	— Полнотекстовые деловые публикации информгентств и прессы по 53 отраслям <a href="https://polpred.com/news">https://polpred.com/news</a>
И.4	Иностраные базы данных (доступ с IP адресов МИСиС):
И.5	— аналитическая база (индексы цитирования) Web of Science <a href="https://apps.webofknowledge.com">https://apps.webofknowledge.com</a>
И.6	— аналитическая база (индексы цитирования) Scopus <a href="https://www.scopus.com/">https://www.scopus.com/</a>
И.7	— наукометрическая система InCites <a href="https://apps.webofknowledge.com">https://apps.webofknowledge.com</a>
И.8	— научные журналы издательства Elsevier <a href="https://www.sciencedirect.com/">https://www.sciencedirect.com/</a>

## 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
Б-416	Учебный комплекс по структурной диагностике и материаловедческой экспертизе неорганических материалов методами оптической микроскопии:	проектор; экран; маркерная доска; компьютер преподавателя; микроскоп Carl Zeiss Axio Scope A1, компьютерный класс на 12 компьютеров, комплект учебной мебели
Б-416	Учебный комплекс по структурной диагностике и материаловедческой экспертизе неорганических материалов методами оптической микроскопии:	проектор; экран; маркерная доска; компьютер преподавателя; микроскоп Carl Zeiss Axio Scope A1, компьютерный класс на 12 компьютеров, комплект учебной мебели
Читальный зал электронных ресурсов		комплект учебной мебели на 55 мест для обучающихся, 50 ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus.

## 8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Проведение лекций осуществляется исключительно в аудиториях, обеспеченных мультимедийным оборудованием, с возможностью показа презентаций и демонстрации компьютерных моделей.

Проведение работ осуществляется в специализированной лаборатории (Б-416), в которой возможна индивидуальная работа студентов с компьютерными моделями, при проведении занятий группы разбиваются на подгруппы, численностью обучающихся не более 12 студентов.

Лекции нацелены на изучение студентами общих вопросов компьютерного моделирования.

Занятия должны быть нацелены на практическое изучение различных математических моделей материалов и процессов и особенностей их применения для моделирования

Предусматриваются домашние задания, включающие задачи активному применению изучаемых компьютерных моделей.

Проведение аудиторных занятий предусматривает использование в учебном курсе активных и интерактивных технологий:

- проведение лекций с использованием интерактивных и мультимедийных технологий (презентация в формате MS PowerPoint);

- использование при проведении занятий специализированной (см. выше) лаборатории с возможностью проведения занятий в интерактивной форме (комплект специального программного обеспечения собственной разработки по моделированию различных процессов и превращений в материалах).

Дисциплина относится к точным наукам и требует значительного объема самостоятельной работы. Отдельные учебные вопросы выносятся на самостоятельную проработку и контролируются посредством текущей аттестации (два домашних задания и одна курсовая работа). При этом организуются групповые и индивидуальные консультации. Качественное освоение дисциплины возможно только при систематической самостоятельной работе, что поддерживается системой аттестации.

Подготовка домашних заданий и курсовых работ проводится в часы самостоятельной работы.