

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 01.09.2023 14:45:32

Уникальный идентификатор документа:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

Аннотация рабочей программы учебной дисциплины

Компьютерные и информационные технологии в науке и производстве

Закреплена за подразделением Кафедра материаловедения полупроводников и диэлектриков

Направление подготовки 22.04.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ

Профиль

Квалификация **Магистр**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **3 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 108

в том числе:

аудиторные занятия 34

самостоятельная работа 74

Формы контроля в семестрах:
зачет с оценкой 3

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	3 (2.1)		Итого	
	19			
Неделя	уп	рп	уп	рп
Лабораторные	17	17	17	17
Практические	17	17	17	17
Итого ауд.	34	34	34	34
Контактная работа	34	34	34	34
Сам. работа	74	74	74	74
Итого	108	108	108	108

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

1.1	Цель – ознакомить учащихся с теорией квантово-химического моделирования. Дать возможность студентам применить свои знания для описания реальных физических результатов полученных в «реальном времени». Работа студента с квантово-химическими методами расчёта позволит ему в дальнейшем успешно применять их для решения исследовательских задач, поскольку в современной науке данные методики занимают особую нишу, позволяя получать с высокой точностью физические результаты без проведения экспериментальной работы.
1.2	Задачи дисциплины:
1.3	1. Ознакомить с теорией квантово-химического моделирования.
1.4	2. Ознакомить с современными пакетами квантово-химического моделирования;
1.5	3. Дать навыки применения современных методов компьютерного моделирования при решении практических задач и стандартными компьютерными программами, применяемыми для этой цели.

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Блок ОП:	Б1.О
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:
2.1.1	Дифракционные методы исследования неупорядоченных структур
2.1.2	Математическое и компьютерное моделирование материалов и процессов
2.1.3	Некоторые главы кристаллохимии
2.1.4	Оптические элементы лазерных систем
2.1.5	Оптические явления в кристаллах. Часть 1
2.1.6	Спектроскопические методы анализа поверхности
2.1.7	Материаловедение и технологии перспективных материалов
2.1.8	Методы электронной микроскопии для материалов твердотельной электроники
2.1.9	Технология получения кристаллов
2.1.10	Физические свойства приповерхностных слоев и методы их исследований
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:
2.2.1	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы
2.2.2	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий
Знать:
УК-1-34 Основы теории полуэмпирических методов моделирования
УК-1-35 Основы теории методов моделирования с помощью эмпирических потенциалов
ОПК-5: Способен оценивать результаты научно-технических разработок, научных исследований и обосновывать собственный выбор, систематизируя и обобщая достижения в области материаловедения и технологии материалов, смежных областях
Знать:
ОПК-5-31 Возможности основных современных методов компьютерного моделирования, области их применимости и методы трактовки химических явлений и процессов
УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий
Знать:
УК-1-31 Основные положения современной теории химической связи, межмолекулярного взаимодействия и реакционной способности веществ и примеры ее применения к описанию явлений происходящих в твёрдых тела
УК-1-32 Основы квантовой механики, основные постулаты и законы квантовой механики
УК-1-33 Основы теории моделирования из первых принципов: теория функционала электронной плотности, метод Хартри-Фока

ОПК-5: Способен оценивать результаты научно-технических разработок, научных исследований и обосновывать собственный выбор, систематизируя и обобщая достижения в области материаловедения и технологии материалов, смежных областях
Уметь:
ОПК-5-У2 Оформлять отчеты по результатам моделирования из первых принципов
ОПК-5-У1 Работать со справочной литературой и другими информационными и нормативными материалами в области компьютерных и информационных технологий
УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий
Уметь:
УК-1-У1 Применять современные методы компьютерного моделирования для расчета, интерпретации и предсказания строения и физико-химических свойств твердых тел
ОПК-5: Способен оценивать результаты научно-технических разработок, научных исследований и обосновывать собственный выбор, систематизируя и обобщая достижения в области материаловедения и технологии материалов, смежных областях
Владеть:
ОПК-5-В1 Методами сбора экспериментальных данных с целью их корректной математической обработки
УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий
Владеть:
УК-1-В1 Навыками применения современных методов компьютерного моделирования при решении практических задач и стандартными компьютерными программами, применяемыми для этой цели