

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 01.09.2023 12:37:39

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

Modern methods of atomistic simulation / Современные методы атомистического моделирования

Закреплена за подразделением

Кафедра теоретической физики и квантовых технологий

Направление подготовки

03.04.02 ФИЗИКА

Профиль

Quantum Physics for Advanced Materials Engineering/ Квантовая физика для современной инженерии материалов

Квалификация

Магистр

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

4 ЗЕТ

Часов по учебному плану

144

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

экзамен 3

аудиторные занятия

34

самостоятельная работа

83

часов на контроль

27

Распределение часов дисциплины по семестрам

| Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>) | 3 (2.1) | | Итого | |
|---|---------|-----|-------|-----|
| | 19 | | | |
| Неделя | 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 | 83 | 83 | 83 | 83 |
| Часы на контроль | 27 | 27 | 27 | 27 |
| Итого | 144 | 144 | 144 | 144 |

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

| | |
|-----|--|
| 1.1 | Цель дисциплины – ознакомить студентов с современными методами квантово-механического моделирования в физике конденсированного состояния, а также дать им начальное представление об основных теоретических методах и алгоритмах, используемых при расчете фундаментальных физических свойств твердых тел. |
| 1.2 | Задачи дисциплины: научить |
| 1.3 | 1. основам общей теории функционала электронной плотности; |
| 1.4 | 2. основным приближениям, используемые при решении задачи многих тел в квантово-механическом моделировании и границы их применимости; |
| 1.5 | 3. основным алгоритмам и методам, применяемые в атомистическом моделировании твердых тел и квантоворазмерных объектов; |
| 1.6 | 4. применять методы квантовой механики, электродинамики и статистической физики к описанию фундаментальных свойств твердых тел. |

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

| | | |
|------------|--|------------|
| Блок ОП: | | Б1.В.ДВ.02 |
| 2.1 | Требования к предварительной подготовке обучающегося: | |
| 2.1.1 | Electron Theory of Metals / Электронная теория металлов | |
| 2.1.2 | Modern Quantum Physics of Solids part 2/ Квантовая физика твердого тела, часть 2 | |
| 2.1.3 | Scientific research / Научно-исследовательская практика | |
| 2.1.4 | Technology and Materials of Quantum Electronics / Технологии и материалы квантовой электроники | |
| 2.1.5 | Management of Quality / Менеджмент качества | |
| 2.1.6 | Modern methods of structural characterisation of micro- and nano-systems/Современные методы диагностики и исследования материалов, нано- и микросистем | |
| 2.1.7 | Modern Quantum Physics of Solids part 1 / Квантовая физика твердого тела, часть 1 | |
| 2.2 | Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее: | |
| 2.2.1 | Master's Thesis / Преддипломная практика | |
| 2.2.2 | Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы | |

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

| | |
|---|--|
| ПК-1: Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов научных исследований в области квантовой физики | |
| Знать: | |
| ПК-1-32 Общую теорию функционала электронной плотности | |
| ПК-1-33 Обосновывать правомерность допущений и приближений, используемых при решении задач; | |
| ПК-1-31 Основные идеи, лежащие в основе методов теоретического описания взаимодействия электронов с атомными ядрами | |
| 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 задачи, для решения которых используются современные методы атомистического моделирования | |
| 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 области применения методов моделирования для описания свойств твердых тел | |
| 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 | |

| |
|---|
| Уметь: |
| ОПК-3-У1 Применять методы и алгоритмы для моделирования свойств реальных кристаллов и наноразмерных систем; |
| 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, выработать стратегию действий |
| Уметь: |
| УК-1-У1 Вести поиск необходимой информации в специальной и справочной литературе и на интернет – ресурсах; |
| ПК-1: Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов научных исследований в области квантовой физики |
| Уметь: |
| ПК-1-У1 Проводить простые оценки и расчеты величин, характерных для рассматриваемых процессов и явлений; |
| Владеть: |
| ПК-1-В1 Навыками качественного и количественного анализа фундаментальных свойств, явлений и процессов в твердых телах; |
| 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, выработать стратегию действий |
| Владеть: |
| УК-1-В1 Применять на практике навыки самостоятельной работы с литературой для поиска информации о понятиях, терминах, задачах и проблемах, объяснения их решения в практических ситуациях. |
| 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 |
| Владеть: |
| ОПК-3-В1 Навыками разработки программных средств для обработки и систематизации полученных результатов атомистического моделирования |
| ОПК-3-В2 Навыками использования программных пакетов для первопринципного моделирования |