

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 31.07.2023 10:41:07

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	19			
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	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
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
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	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	
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**

<b>ПК-1: Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов научных исследований в области квантовой физики</b>	
<b>Знать:</b>	
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	
<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>Знать:</b>	
ОПК-3-31 Основные задачи, для решения которых используются современные методы атомистического моделирования	
<b>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</b>	
<b>Знать:</b>	
УК-1-31 Основные области применения методов моделирования для описания свойств твердых тел	
<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 и алгоритмы для моделирования свойств реальных кристаллов и наноразмерных систем;
<b>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</b>
<b>Уметь:</b>
УК-1-У1 Вести поиск необходимой информации в специальной и справочной литературе и на интернет – ресурсах;
<b>ПК-1: Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов научных исследований в области квантовой физики</b>
<b>Уметь:</b>
ПК-1-У1 Проводить простые оценки и расчеты величин, характерных для рассматриваемых процессов и явлений;
<b>Владеть:</b>
ПК-1-В1 Навыками качественного и количественного анализа фундаментальных свойств, явлений и процессов в твердых телах;
<b>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</b>
<b>Владеть:</b>
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.
<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 Навыками разработки программных средств для обработки и систематизации полученных результатов атомистического моделирования
ОПК-3-В2 Навыками использования программных пакетов для первопринципного моделирования

