

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной работе

Дата подписания: 27.10.2023 12:14:46

Уникальный идентификатор документа:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования**

**«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»**

## Рабочая программа дисциплины (модуля)

### Цифровое материаловедение

Закреплена за подразделением Кафедра функциональных наносистем и высокотемпературных материалов

Направление подготовки 22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ

Профиль

Квалификация **Инженер-исследователь**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **5 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 180

в том числе:

аудиторные занятия 51

самостоятельная работа 93

часов на контроль 36

Формы контроля в семестрах:  
экзамен 11

#### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	11 (6.1)		Итого	
	Неделя 18			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	34	34	34	34
Практические	17	17	17	17
Итого ауд.	51	51	51	51
Контактная работа	51	51	51	51
Сам. работа	93	93	93	93
Часы на контроль	36	36	36	36
Итого	180	180	180	180

Программу составил(и):

*к.ф.-м.н., доцент, Карпенков Дмитрий Юрьевич*

Рабочая программа

**Цифровое материаловедение**

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС» по направлению подготовки 22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ (приказ от 28.06.2023 г. № 292 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ, 22.03.01-БМТМ-23\_6-ПП.plx , утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.06.2023, протокол № 5-23

Утверждена в составе ОПОП ВО:

22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ, , утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.06.2023, протокол № 5-23

Рабочая программа одобрена на заседании

**Кафедра функциональных наносистем и высокотемпературных материалов**

Протокол от г., №

Руководитель подразделения к.т.н. профессор Кузнецов Денис Валерьевич

**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.
-----	--

**2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

	Блок ОП:	Б1.В.ДВ.40
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
2.1.1	Биоорганическая химия	
2.1.2	Высокотемпературные керамические материалы	
2.1.3	Жаропрочные и радиационно-стойкие материалы	
2.1.4	Квантовая теория твердого тела	
2.1.5	Математическое и компьютерное моделирование материалов и процессов электроники	
2.1.6	Методы исследования макро- и микроструктуры материалов	
2.1.7	Методы непараметрической статистики	
2.1.8	Некоторые главы кристаллохимии	
2.1.9	Объемные наноматериалы	
2.1.10	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.11	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.12	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.13	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.14	Процессы получения и обработки сверхтвердых материалов	
2.1.15	Структура и технологичность сплавов	
2.1.16	Физико-химия эволюции твердого вещества	
2.1.17	Ядерно-спектроскопические и синхротронные методы исследований	
2.1.18	Аморфные, микро- и нанокристаллические материалы	
2.1.19	Биофизика	
2.1.20	Высокотемпературные и сверхтвердые функциональные и конструкционные материалы	
2.1.21	Компьютерные и информационные технологии в науке и производстве	
2.1.22	Материаловедение и технологии перспективных материалов	
2.1.23	Методы исследования характеристик и свойств материалов	
2.1.24	Методы электронной микроскопии для материалов твердотельной электроники	
2.1.25	Метрология и испытания функциональных материалов	
2.1.26	Основы научно-технического перевода	
2.1.27	Практика научно-технического перевода и редактирования	
2.1.28	Тензорные методы в кристаллофизике	
2.1.29	Технология получения кристаллов	
2.1.30	Физические основы магнетизма и процессы перемагничивания материалов	
2.1.31	Физические свойства приповерхностных слоев и методы их исследований	
2.1.32	Функциональные наноматериалы	
2.1.33	Химия и технология полимерных материалов	
2.1.34	Атомная и электронная структура поверхности и межфазных границ	
2.1.35	Композиционные материалы	
2.1.36	Конструирование композиционных материалов	
2.1.37	Методы исследования структур и материалов. Часть 2	
2.1.38	Поверхностное модифицирование материалов и защитные покрытия	
2.1.39	Специальные сплавы	
2.1.40	Физическое материаловедение сплавов с особыми магнитными свойствами, часть 1. Магнитно-мягкие сплавы	
2.1.41	Физическое материаловедение сплавов с особыми магнитными свойствами, часть 2. Магнитно-твердые сплавы	
2.1.42	Атомное строение фаз	
2.1.43	Биохимия наноматериалов	
2.1.44	Инженерия поверхности	
2.1.45	Металловедение и термическая обработка металлов	

2.1.46	Методы исследования структур и материалов. Часть 1
2.1.47	Методы исследования физических свойств полупроводниковых структур
2.1.48	Наноматериалы
2.1.49	Сверхтвердые материалы
2.1.50	Технологии материалов с особыми физическими свойствами
2.1.51	Фазовые и структурные изменения при формировании материалов и эпитаксиальных структур
2.1.52	Физика магнитных явлений
2.1.53	Физика полупроводниковых приборов
2.1.54	Физика прочности
2.1.55	Физика прочности и механические свойства материалов
2.1.56	Физико-химия металлов и неметаллических материалов
2.1.57	Физические основы деформации и разрушения
2.1.58	Диффузия и диффузионно-контролируемые процессы
2.1.59	Материаловедение
2.1.60	Материаловедение полупроводников и диэлектриков
2.1.61	Металловедение инновационных материалов
2.1.62	Методы исследования материалов
2.1.63	Метрология и стандартизация цифровых технологий в материаловедении и металлургии
2.1.64	Метрология и технические измерения функциональных материалов
2.1.65	Метрология, стандартизация и технические измерения
2.1.66	Метрология, стандартизация и технические измерения в электронике
2.1.67	Основы материаловедения и методов исследования материалов
2.1.68	Разработка новых материалов
2.1.69	Фазовые равновесия и дефекты структуры
2.1.70	Физика диэлектриков
2.1.71	Физика полупроводников
2.1.72	Введение в квантовую теорию твердого тела
2.1.73	Дефекты кристаллической решетки
2.1.74	Компьютеризация эксперимента
2.1.75	Материалы альтернативной энергетики
2.1.76	Материалы наукоемких технологий
2.1.77	Основы дизайна металлических материалов
2.1.78	Планирование и организация научно-исследовательской работы
2.1.79	Планирование научного эксперимента
2.1.80	Современные проблемы материаловедения
2.1.81	Теория поверхностных явлений
2.1.82	Теория симметрии
2.1.83	Электроника
2.1.84	Кристаллография
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>
2.2.1	Нормы и правила оформления ВКР
2.2.2	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы
2.2.3	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы
2.2.4	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы
2.2.5	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы
2.2.6	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы
2.2.7	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы
2.2.8	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы
2.2.9	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы

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

<b>ПК-1: Способен к поиску новых направлений научных исследований и синтезу знаний в области материаловедения и технологии материалов, способен оформлять технические задания и отчетные материалы по планируемым и проведенным исследованиям</b>
<b>Знать:</b>
ПК-1-33 области применения методов моделирования для описания свойств твердых тел
ПК-1-32 основы теории функционала плотности
ПК-1-31 основы квантовой теории твердого тела
<b>Уметь:</b>
ПК-1-У1 обосновывать применение допущений и приближений, используемых при решении задач цифрового материаловедения
<b>Владеть:</b>
ПК-1-В1 навыками использования программных пакетов для первопринципных расчетов

#### 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. Основные подходы и основные приближения в описании электронной структуры твердого тела.</b>							
1.1	Основные подходы и основные приближения к описанию электронной структуры твердого тела. Понятие атома в твердом теле. Основные понятия квантовой физики твердого тела: зонная структура, плотность состояний. /Лек/	11	4	ПК-1-31 ПК-1-33	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.2			
1.2	Симметрия кристаллов. Приближение Хартри-Фока. Модель однородного электронного газа. /Лек/	11	3	ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.3 Л2.4Л3.2			
1.3	Решетка Браве, базис, зона Бриллюэна, теорема Блоха, обратная решетка и ее свойства. /Лек/	11	2	ПК-1-32 ПК-1-33	Л1.1 Л1.3Л2.3 Л2.4Л3.2			
1.4	Освоение теоретического материала раздела 1 /Ср/	11	12	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.3 Л2.4Л3.2			
	<b>Раздел 2. Общая теория функционала электронной плотности.</b>							
2.1	Электронная плотность как основная характеристика системы. Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шема. /Лек/	11	3	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2 Э5			
2.2	Функционалы для обменного взаимодействия и электронной корреляции. Приближение локальной плотности (LDA), метод обобщенных градиентных поправок (GGA). /Лек/	11	4	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.1 Л2.3 Л2.4Л3.2 Э5			

2.3	Самосогласованный расчет зонной структуры в периодическом кристалле. Общая схема самосогласованного решения уравнений Кона-Шема. Теорема Гельмана-Фейнмана. /Лек/	11	2	ПК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.3 Л2.4Л3.2 Э5			
2.4	Интегрирование по зоне Бриллюэна, учет симметрии. Точность расчетов. Функционал полной энергии. /Пр/	11	3	ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-33	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4			P1
2.5	Основные современные техники учета многочастичных взаимодействий. /Пр/	11	2	ПК-1-32 ПК-1-33 ПК-1-У1	Л1.1 Л2.4 Л1.3Л2.3Л3.2 Э5			P2
2.6	Программные пакеты для первопринципных расчетов. /Пр/	11	2	ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5			P2
2.7	Расчет электронной структуры в базе плоских волн. Электрон в слабом периодическом потенциале. Формфактор и структурный фактор. Приближение «маффин-тин» потенциала и приближение атомной сферы в кристаллическом потенциале. /Лек/	11	2	ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.2 Л2.4Л3.2			
2.8	Введение в метод псевдопотенциала и технику PAW. Метод проектора присоединенных волн (PAW). Спектр возбуждений. Метод функций Грина и матрицы рассеяния. Конструирование базиса МТ-орбиталей. /Лек/	11	2	ПК-1-31	Л1.1 Л1.3Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.2			
2.9	Расчет равновесных объемов, объемных модулей, плотности состояний для чистых элементов. Сравнение с экспериментом. /Пр/	11	4	ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4			P2
2.10	Расчет энергии и равновесной длины связи молекулы водорода, кислорода, азота, хлора, фтора. /Пр/	11	2	ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4			P2
2.11	Освоение теоретического материала раздела 2 /Ср/	11	24	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.2 Э5			
	<b>Раздел 3. Приближения и аппроксимации для моделирования реальных систем.</b>							

3.1	Учет дефектов и нестехиометрии: приближение когерентного потенциала и метод суперячеек. Линейное масштабирование методов. /Лек/	11	2	ПК-1-31	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э5			
3.2	Блоховская спектральная функция. Локальные и дальнедействующие взаимодействия в квантовой механике. Линейное скалирование методов с локализованными орбиталями. /Лек/	11	4	ПК-1-У1 ПК-1 -В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э1 Э2 Э3 Э4			
3.3	Магнитная структура. Метод неупорядоченных магнитных моментов. /Лек/	11	2	ПК-1-У1 ПК-1 -В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2			
3.4	Исследование упорядоченных соединений и неупорядоченных сплавов (в приближении когерентного потенциала), расчет энтальпии смещения и магнитной структуры /Ср/	11	4	ПК-1-У1 ПК-1 -В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э1 Э2 Э3 Э4			
3.5	Исследование чистых элементов и упорядоченных соединений с помощью пакета программ VASP или ABINIT или Quantum Espresso. Моделирование неупорядоченных сплавов с использованием квазиупорядоченных ячеек (SQS). /Ср/	11	4	ПК-1-У1 ПК-1 -В1	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э1 Э2 Э3 Э4			
3.6	Освоение теоретического материала раздела 3 /Ср/	11	34	ПК-1-31	Л1.1 Л1.3Л2.4Л3. 2 Э5			P2
	<b>Раздел 4. Динамика решетки.</b>							
4.1	Динамика решетки. Фононы и проблема динамической стабильности. Матрица силовых констант. /Лек/	11	4	ПК-1-31	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2			
4.2	коллоквиум /Пр/	11	4	ПК-1-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3		КМ1	
4.3	Освоение теоретического материала раздела 4 /Ср/	11	15	ПК-1-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2			

### 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

<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	коллоквиум	ПК-1-В1;ПК-1-У1;ПК-1-33	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Периодические электронные зоны.</li> <li>2. Периодичность, теорема Блоха и зоны Бриллюэна.</li> <li>3. Приближение Хартри-Фока.</li> <li>4. Локальные магнитные моменты и модель Гейзенберга.</li> <li>5. Единая модель электронного газа.</li> <li>6. Теорема Хоэнберг-Кона.</li> <li>7. Уравнения Кона-Шема.</li> <li>8. Функционалы обмена и корреляции.</li> <li>9. Приближение локальной плотности (LDA).</li> <li>10. Приближение локальной спиновой плотности (LSDA).</li> <li>11. Обобщенные градиентные приближения (GGA)</li> <li>12. Ограничения LDA и GGA.</li> <li>13. Электрон в слабом периодическом потенциале.</li> <li>14. Кристаллы и молекулы. Выбор базисных волновых функций.</li> <li>15. Теорема Хеллмана Феймана.</li> <li>16. МТ-приближение (МТ) и приближение (ASA) атомной сферы для кристаллических потенциалов.</li> <li>17. Приближение когерентного потенциала (CPA).</li> <li>18. Псевдопотенциалы.</li> <li>19. Метод проектора дополненной волны (метод PAW).</li> <li>20. Различные способы рассеяния: подход ККР</li> <li>21. Метод локальносамосогласованных функций Грина (LSGF).</li> <li>22. Суперчейка подход.</li> <li>23. Модель неупорядоченных магнитных моментов (DLM).</li> </ol>
<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	Практическая работа	ПК-1-33;ПК-1-У1	<p>Перечень вариантов:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Волновая функция, волновой пакет</li> <li>2. Постулаты. Принцип неопределенностей</li> <li>3. Операторы физических величин и операции с ними</li> <li>4. Распределение Ферми-Дирака. Квантовые числа, принцип Паули</li> <li>5. Уравнение Шредингера</li> <li>6. Одночастичное уравнение Шредингера</li> <li>7. Частица в потенциальной яме с бесконечными стенками, с конечными стенками, туннелирование</li> <li>8. Уравнение Шредингера для атома водорода, расчет сферических гармоник и построение орбиталей</li> </ol>



P2	Практическая работа	ПК-1-У1;ПК-1-В1	Перечень вариантов: 1. Вариационный метод решения УШ. Уравнение Кона-Шема. Метод псевдопотенциалов. Самосогласованный расчет уравнения КШ 2. Понятие псевдопотенциал, тестирование псевдопотенциалов 3. Зонная структура металлов и изоляторов (п/п), расчет зон, ширины запрещенной зоны 4. Плотность состояний металлов и изоляторов, расчет общей плотности состояний 5. Расчет плотности состояний и проекций орбиталей атомов 6. Коллинеарный магнетизм. Учет спиновой-поляризации в расчетах зонной структуры и плотности состояний (spin up/down) 7. Неколлинеарный магнетизм. Спин-орбитальное взаимодействие. Расчеты с использованием полностью релятивистских потенциалов (повтор пункта 2-4). 8. Расчет энергии магнитной анизотропии. МАЕ 9. Вычисление обменного интеграла в рамках модели Гейзенберга. Применение метода Монте-Карло для расчета температуры Кюри. 10. Функция локализации электронов (ELF), расчет ELF 11. Модель Хаббарда, поправка U
----	---------------------	-----------------	---

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

По курсу предусмотрен экзамен в третьем семестре.  
Форма экзамена - ответ на экзаменационный билет.

1. Уравнения Кона-Шема.
2. Метод локальносамосогласованных функций Грина (LSGF).

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

«Отлично» Обучающийся глубоко и содержательно раскрывает ответ на каждый теоретический вопрос, не допустив ошибок. Ответ носит развернутый и исчерпывающий характер  
«Хорошо» Обучающийся в целом раскрывает теоретические вопросы, однако ответ хотя бы на один из них не носит развернутого и исчерпывающего характера  
«Удовлетворительно» Обучающийся фрагментарно раскрывает содержание теоретических вопросов, допускает значительные неточности  
«Неудовлетворительно» Обучающийся не знает ответов на поставленные теоретические вопросы

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

### 6.1. Рекомендуемая литература

#### 6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Ашкрофт Н., Мермин Н.	Физика твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1979
Л1.2	Ашкрофт Н., Мермин Н.	Физика твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1978
Л1.3	Киттель Ч., Гусев А. А.	Введение в физику твердого тела: учеб. руководство	Библиотека МИСиС	М.: МедиаСтар, 2006

#### 6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Займан Д. М., Бонч-Бруевич В. Д.	Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах: монография	Электронная библиотека	Москва: Изд-во иностр. лит., 1962
Л2.2	Харрисон У., Сурис Р. А.	Теория твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1972

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.3	Марч Н., Янг У., Сампантхар С., Зубарев Д. Н., Плакида Н. М.	Проблема многих тел в квантовой механике	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1969
Л2.4	Займан Д.	Принципы теории твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1974

### 6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1	Векилов Юрий Хоренович, Кузьмин Юрий Михайлович	Дифракционные и резонансные методы исследования структуры металлов и сплавов: Разд.: Динамика кристаллической решетки и электрон- фанонное взаимодействие: курс лекций для студентов спец. 11.05	Библиотека МИСиС	М.: Учеба, 1989
Л3.2	Векилов Юрий Хоренович, Кузьмин Юрий Михайлович	Дифракционные и резонансные методы исследования структуры металлов и сплавов: Разд.: Современные теоретические методы исследования электронной структуры твердых тел: курс лекций для студентов спец. 11.05	Библиотека МИСиС	М.: Учеба, 1989

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

Э1	VASP Vienna ab initio packet Пакет программ первопринципного моделирования	<a href="https://www.vasp.at/wiki/index.php/The_VASP_Manual">https://www.vasp.at/wiki/index.php/The_VASP_Manual</a>
Э2	ABINIT Пакет программ первопринципного моделирования	<a href="https://docs.abinit.org/tutorial/">https://docs.abinit.org/tutorial/</a>
Э3	QUANTUM ESPRESSO Пакет программ первопринципного моделирования	<a href="https://www.quantum-espresso.org/resources/tutorials">https://www.quantum-espresso.org/resources/tutorials</a>
Э4	EMTO Пакет программ первопринципного моделирования	<a href="https://emto.gitlab.io/">https://emto.gitlab.io/</a>
Э5	Введение в теорию функционала плотности	<a href="http://master-mcn.u-strasbg.fr/wp-content/uploads/2015/09/DFT.pdf">http://master-mcn.u-strasbg.fr/wp-content/uploads/2015/09/DFT.pdf</a>

### 6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	LMS Canvas
П.2	Python
П.3	ОС Linux (Ubuntu) / Windows
П.4	Putty
П.5	Xming server
П.6	VASP
П.7	ABINIT
П.8	QUANTUM ESPRESSO
П.9	EMTO

### 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	Иностранные базы данных (доступ с IP адресов МИСиС):
И.4	— аналитическая база (индексы цитирования) Web of Science <a href="https://apps.webofknowledge.com">https://apps.webofknowledge.com</a>
И.5	— аналитическая база (индексы цитирования) Scopus <a href="https://www.scopus.com/">https://www.scopus.com/</a>

И.6	— наукометрическая система InCites <a href="https://apps.webofknowledge.com">https://apps.webofknowledge.com</a>
И.7	— научные журналы издательства Elsevier <a href="https://www.sciencedirect.com/">https://www.sciencedirect.com/</a>

### 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
Б-1003	Учебная аудитория:	доска аудиторная меловая, экран проекционный, проектор, документ камера, панель плазменная Panasonic, стационарные компьютеры 16 шт., пакет лицензионных программ MS Office, комплект учебной мебели
Читальный зал №3 (Б)		комплект учебной мебели на 44 места для обучающихся, МФУ Xerox VersaLink B7025 с функцией масштабирования текстов и изображений, 8 ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus.
Любой корпус Мультимедийная	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и/или для проведения практических занятий:	комплект учебной мебели до 36 мест для обучающихся, мультимедийное оборудование, магнитно-маркерная доска, рабочее место преподавателя, 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

Дисциплина относится к естественным наукам и требует значительного объема самостоятельной работы. Качественное освоение дисциплины возможно только при систематической самостоятельной работе.