

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 31.08.2023 11:06:34

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)

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

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

зачет с оценкой 3

аудиторные занятия

34

самостоятельная работа

74

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	3 (2.1)		Итого	
	19			
Неделя	УП	РП	УП	РП
Вид занятий	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

Программу составил(и):

д.ф.-м.н., проф., Сорокин П.Б.

Рабочая программа

Компьютерные и информационные технологии в науке и производстве

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 22.04.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

22.04.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ, 22.04.01-ММТМ-23-4.plx , утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.06.2023, протокол № 5-23

Утверждена в составе ОПОП ВО:

22.04.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ, , утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.06.2023, протокол № 5-23

Рабочая программа одобрена на заседании

Кафедра материаловедения полупроводников и диэлектриков

Протокол от г., №

Руководитель подразделения Оганов А.Р.

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 сегодняшней 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

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
	Раздел 1. Введение в курс							
1.1	Историческая справка /Лаб/	3	1	ОПК-5-31	Л1.1		КМ1	
1.2	Основы квантовой механики /Лаб/	3	3	УК-1-32	Л1.2		КМ1	
1.3	Поверхность потенциальной энергии и методы минимизации энергии /Лаб/	3	2	ОПК-5-31	Л1.4		КМ1	
1.4	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	3	14	ОПК-5-У1	Л1.1 Л1.2 Л1.4		КМ1	
	Раздел 2. Обзор эмпирических, полуэмпирических и ab initio методов							
2.1	Обзор методов моделирования на атомной уровне /Лаб/	3	1	УК-1-33 УК-1-34 УК-1-35 ОПК-5-31	Л1.4		КМ1	
2.2	Метод Хартри-Фока /Лаб/	3	2	УК-1-32 УК-1-33	Л1.3 Л1.4		КМ1	
2.3	Теория функционала электронной плотности /Лаб/	3	2	УК-1-33	Л1.4		КМ1	

2.4	Эмпирические потенциалы /Лаб/	3	2	УК-1-35			КМ1	
2.5	Полуэмпирические методы моделирования /Лаб/	3	2	УК-1-34			КМ1	
2.6	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	3	24	УК-1-33 УК-1-34 УК-1-35 ОПК-5-31	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4		КМ1	
	Раздел 3. Практические аспекты применения методов моделирования на атомном уровне							
3.1	Моделирование поверхности, молекул и наноструктур /Лаб/	3	1	УК-1-31 ОПК-5-31			КМ1	
3.2	Фазовые диаграммы /Лаб/	3	1	УК-1-31 ОПК-5-31	Л1.1		КМ1	
3.3	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	3	8	ОПК-5-31	Л1.1 Л1.4		КМ1	
	Раздел 4. Моделирование атомной структуры и стабильности кристаллов							
4.1	Изучение структуры кристалла и построение входного файла для проведения расчета в программном пакете Siesta /Пр/	3	1	ОПК-5-31	Э1			Р1
4.2	Получение энергии когезии кристалла с помощью квантовохимических методов /Пр/	3	2	УК-1-У1 УК-1-В1 ОПК-5-31	Э1			Р1
4.3	Сравнение результата с литературными данными /Пр/	3	1	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-У2 ОПК-5-В1				Р1
4.4	Теоретическая подготовка к практическому занятию /Ср/	3	9	ОПК-5-31	Л1.1			Р1
	Раздел 5. Моделирование колебательных свойств кристаллов							
5.1	Построение суперячейки для расчёта колебаний /Пр/	3	1	ОПК-5-31	Э1			Р2
5.2	Проведение расчёта фононов /Пр/	3	3	УК-1-У1 УК-1-В1 ОПК-5-31	Э1			Р2
5.3	Сравнение результата с литературными данными /Пр/	3	1	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-У2 ОПК-5-В1				Р2
5.4	Теоретическая подготовка к практическому занятию /Ср/	3	9	ОПК-5-31	Л1.4 Э1			Р2
	Раздел 6. Моделирование упругих свойств кристаллов							

6.1	Изучение структуры кристалла и построение входного файла для проведения расчета в программном пакете Siesta /Пр/	3	1	ОПК-5-31	Э1			Р3
6.2	Поиск предела использования упругого приближения /Пр/	3	3	УК-1-У1 УК-1-В1 ОПК-5-31				Р3
6.3	Расчет упругих постоянных для выбранных структур /Пр/	3	3	УК-1-У1 УК-1-В1 ОПК-5-31	Э1			Р3
6.4	Сравнение результата с литературными данными /Пр/	3	1	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-У2 ОПК-5-В1				Р3
6.5	Теоретическая подготовка к практическому занятию /Ср/	3	10	ОПК-5-31	Л1.1 Э1			Р3

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки

Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
КМ1	Зачёт	УК-1-31;УК-1-32;УК-1-33;УК-1-34;УК-1-35;ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ОПК-5-У2;ОПК-5-В1;УК-1-У1;УК-1-В1	<p>Основы квантовой механики. Квантовая яма. Атом водорода. Общий гамильтониан для конденсированного вещества. Многоэлектронные системы. Приближение среднего поля. Приближение Борна-Оппенгеймера. Поверхность потенциальной энергии. Методы поиска минимума энергии. Обзор эмпирических, полуэмпирических и ab initio методов. Приближение сильной связи. Ортогональный и неортогональный метод сильной связи. Метод Слейтера-Костера. Теория функционала электронной плотности. Теория Томаса-Ферми. Теория Хоэнберга и Кона. Самосогласованные уравнения Кона-Шэма. Приближение локальной электронной плотности (LDA). Обобщённое градиентное приближение (GGA). Гибридные обменно-корреляционные функционалы. Обменно-корреляционные функционалы с учётом ван-дер-ваальсового взаимодействия. Эмпирические потенциалы. Парные потенциалы. Многочастичные потенциалы. Практические аспекты применения методов моделирования на атомном уровне. Моделирование поверхности, молекул и наноструктур. Метод сверхъядейки. Коэффициенты диффузии. Фазовые диаграммы.</p>

5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)

Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы
Р1	Практическая работа №1	УК-1-31;УК-1-33	Моделирование атомной структуры и стабильности кристаллов
Р2	Практическая работа №2	УК-1-31	Моделирование колебательных свойств кристаллов
Р3	Практическая работа №3	УК-1-31;УК-1-33	Моделирование упругих свойств кристаллов

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

экзамен не предусмотрен

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

Студент получает зачет при условии выполнения практических работ и демонстрации полученных знаний

Студент получает оценку за курсовую работу:

"отлично" - глубокое понимание студентом теоретических основ методов моделирования на атомном уровне, освоение компетенций, предполагаемых курсом, выполнении всех практических работ;

"хорошо" - понимание с незначительными неточностями теоретических основ методов моделирования на атомном уровне, освоение компетенций, предполагаемых курсом, выполнении всех практических работ;

"удовлетворительно" - общее понимание теоретических основ методов моделирования на атомном уровне при некоторых существенных неточностях, освоение компетенций, предполагаемых курсом, выполнении менее половины всех практических работ;

"неудовлетворительно" - непонимание теоретических основ методов моделирования на атомном уровне, неосвоение компетенций, предполагаемых курсом, не выполнении практических работ;

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

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Киттель Ч.	Введение в физику твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1978
Л1.2	Давыдов А. С.	Квантовая механика: монография	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1973
Л1.3	Фок В. А.	Начала квантовой механики: монография	Электронная библиотека	Б.м.: б.и., 1974
Л1.4	Крашенинин В. И., Кузьмина Л. В., Газенаур Е. Г.	Квантовая химия: учебное пособие	Электронная библиотека	Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2019

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Э1	Документация к пакету Siesta (англ.) // URL: https://gitlab.com/siesta-project/siesta/-/releases/v4.1.5/downloads/siesta.pdf	
----	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--

6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	MS Teams
П.2	Microsoft Office

6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

И.1	Открытая информационно-справочная система http://www.codenet.ru/
-----	-------------------------------------------------------------------------------------------------------

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
К-420	Аудитория для самостоятельной работы	стационарные компьютеры - 10 шт., пакет лицензионных программ MS Office, доска аудиторная меловая/маркерная, 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.
К-420	Аудитория для самостоятельной работы	стационарные компьютеры - 10 шт., пакет лицензионных программ MS Office, доска аудиторная меловая/маркерная, комплект учебной мебели
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

Студентам рекомендуется посещать все занятия. На практических занятиях в конспект следует заносить всё, что рекомендует преподаватель. Анализ результатов и отработка упражнений, изученных на практических занятиях, экономит

время и способствует лучшему усвоению материала.

Студентам рекомендуется с самого начала освоения данного курса работать с литературой и предлагаемыми заданиями в форме подготовки к очередному аудиторному занятию. При этом актуализируются имеющиеся знания, а также создается база для усвоения нового материала, возникают вопросы, ответы на которые студент получает в аудитории. Рекомендуется сдавать выполненные самостоятельные работы и домашнее задание в течение 2-3 недель с момента раздачи.

При освоении данного курса студент должен пользоваться библиотекой вуза, а также электронными базами учебной литературы, в соответствии с настоящей программой.