

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по безопасности и общим вопросам

Дата подписания: 02.08.2023 16:32:10

Уникальный программный ключ:

d7a26b9e8ca85e98ac3de2ab454b4659d961f749

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Рабочая программа дисциплины (модуля)

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	
	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

Программу составил(и):

к.ф.-м.н., доцент, Смирнова Екатерина Александровна; д.ф.-м.н., ведущий эксперт, Абрикосов Игорь Анатольевич

Рабочая программа

Modern methods of atomistic simulation / Современные методы атомистического моделирования

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 03.04.02 ФИЗИКА (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

03.04.02 ФИЗИКА, 03.04.02_МФ3-22-3А.plx Quantum Physics for Advanced Materials Engineering/ Квантовая физика для современной инженерии материалов, утвержденного Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" в составе соответствующей ОПОП ВО 22.09.2022, протокол № 8-22

Утверждена в составе ОПОП ВО:

03.04.02 ФИЗИКА, Quantum Physics for Advanced Materials Engineering/ Квантовая физика для современной инженерии материалов, утвержденной Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" 22.09.2022, протокол № 8-22

Рабочая программа одобрена на заседании

Кафедра теоретической физики и квантовых технологий

Протокол от 23.06.2023 г., №7/22

Руководитель подразделения Д.Ф.-м.н. профессор Мухин Сергей Иванович

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

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. Основные подходы и основные приближения в описании электронной структуры твердого тела. /Basic approaches and basic approximations in the description of the electronic structure of a solid.							

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. /Basic approaches and basic approximations to the description of the electronic structure of a solid. The concept of an atom in a solid body. Basic concepts of quantum solid state physics: band structure, density of states /Лек/	3	2	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ПК -1-31	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.2			
1.2	Симметрия кристаллов. Приближение Хартри-Фока. Модель однородного электронного газа. /Symmetry of crystals. The Hartree-Fock approximation. Model of homogeneous electron gas. /Лек/	3	2	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ПК -1-31	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.2 Л2.3Л3.2			
1.3	Решетка Браве, базис, зона Бриллюэна, теорема Блоха, обратная решетка и ее свойства. /Bravais lattice, basis, Brillouin zone, Bloch theorem, reciprocal lattice and its properties. /Пр/	3	2	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 УК -1-У1 ПК-1-31 ПК-1-33	Л1.1 Л1.3Л2.2 Л2.3Л3.2			
1.4	Освоение теоретического материала раздела 1 /Mastering the theoretical material of section 1 /Ср/	3	8	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 УК -1-31 УК-1-У1 УК-1-В1 ПК-1 -31	Л1.1 Л1.3Л2.2 Л2.3Л3.2			
	Раздел 2. Общая теория функционала электронной плотности. /General theory of the electron density functional.							
2.1	Электронная плотность как основная характеристика системы. Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шема. /Electron density as the main characteristic of the system. Hohenberg-Kohn theorem. Kohn-Shem equations. /Лек/	3	2	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 УК -1-31 ПК-1-31 ПК-1-32	Л1.1 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.1 Л3.2 Э4			

2.2	Функционалы для обменного взаимодействия и электронной корреляции. Приближение локальной плотности (LDA), метод обобщенных градиентных поправок (GGA). /Functionals for exchange interaction and electronic correlation. Local density approximation (LDA), generalized gradient correction method (GGA). /Лек/	3	2	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 УК-1-31 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-33 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.2 Л2.3Л3.2 Э4			
2.3	Самосогласованный расчет зонной структуры в периодическом кристалле. Общая схема самосогласованного решения уравнений Кона-Шема. Теорема Гельмана-Фейнмана. /Self-consistent calculation of the band structure in a periodic crystal. General scheme for self-consistent solution of the Kohn-Sham equations. Gelman-Feynman theorem. /Лек/	3	3	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 УК-1-31 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-33 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.2 Л2.3Л3.2 Э4			
2.4	Интегрирование по зоне Бриллюэна, учет симметрии. Точность расчетов. Функционал полной энергии. /Integration over the Brillouin zone, symmetry taken into account. Calculation accuracy. The total energy functional. /Пр/	3	2	ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ОПК-3-В2 УК-1-31 УК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.3Л3.2 Э1 Э2 Э3			
2.5	Программные пакеты для первопринципных расчетов. /Software packages for first-principles calculations. /Пр/	3	3	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ОПК-3-В2 УК-1-31 УК-1-У1 УК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-33	Л1.1 Л1.3Л2.3Л3.2 Э1 Э2 Э3			
2.6	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. /Calculation of the electronic structure in the basis of plane waves. Electron in a weak periodic potential. Form factor and structural factor. Approximation "muffin-tin" potential and approximation of the atomic sphere in the crystal potential. /Лек/	3	2	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 УК-1-31 УК-1-У1 ПК-1-32 ПК-1-33 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.1 Л2.3Л3.2			

2.7	<p>Введение в метод псевдопотенциала и технику PAW. Метод проектора присоединенных волн (PAW). Спектр возбуждений. Метод функций Грина и матрицы рассеяния. Конструирование базиса MT-орбиталей. /An introduction to the pseudopotential method and the PAW technique. Augmented wave projector (PAW) method. Excitation spectrum. Green's function method and scattering matrix. Construction of the basis of MT orbitals. /Лек/</p>	3	2	<p>ОПК-3-31 ОПК-3-У1 УК-1-31 УК-1-У1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-33 ПК-1-У1</p>	<p>Л1.1 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.2</p>			
2.8	<p>Расчет равновесных объемов, объемных модулей, плотности состояний для чистых элементов. Сравнение с экспериментом. /Calculation of equilibrium volumes, bulk moduli, density of states for pure elements. Comparison with experiment. /Пр/</p>	3	4	<p>ОПК-3-В1 ОПК-3-У1 ОПК-3-31 ОПК-3-В2 УК-1-31 УК-1-У1 УК-1-В1 ПК-1-В1</p>	<p>Л1.1 Л1.3Л2.3Л3.2 2 Э1 Э2 Э3</p>			
2.9	<p>Освоение теоретического материала раздела 2 /Mastering the theoretical material of section 2 /Ср/</p>	3	20	<p>ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ОПК-3-В2 УК-1-31 УК-1-У1 УК-1-В1 ПК-1-В1</p>	<p>Л1.1 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.2 Э4</p>			
	<p>Раздел 3. Приближения и аппроксимации для моделирования реальных систем. /Approximations and approximations for modeling real systems.</p>							
3.1	<p>Учет дефектов и нестехиометрии: приближение когерентного потенциала и метод суперячеек. Линейное масштабирование методов. Магнитные взаимодействия /Accounting for defects and nonstoichiometry: the coherent potential approximation and the supercell method. Linear scaling methods. Magnetic interactions /Лек/</p>	3	2	<p>ОПК-3-31 ОПК-3-У1 УК-1-31 УК-1-У1 ПК-1-33</p>	<p>Л1.1 Л1.3Л2.3Л3.2 2 Э4</p>			

3.2	Блоховская спектральная функция. Локальные и дальнедействующие взаимодействия в квантовой механике. Линейное скалирование методов с локализованными орбиталями. /Bloch spectral function. Local and long-range interactions in quantum mechanics. Linear scaling of methods with localized orbitals. /Ср/	3	4	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ОПК-3-В2 УК-1-У1 УК-1-В1 ПК-1-33 ПК-1-В1	Л1.1 Л1.3Л2.3Л3. 2 Э1 Э2 Э3			
3.3	Моделирование неупорядоченных сплавов с использованием квазиразупорядоченных ячеек (SQS). /Modeling of disordered alloys using quasi disordered cells (SQS). /Пр/	3	2	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ОПК-3-В2 ПК-1-В1	Л1.1 Л1.3 Л3.2			
3.4	Исследование упорядоченных соединений и неупорядоченных сплавов (в приближении когерентного потенциала), расчет энтальпии смешения и магнитной структуры. /Study of ordered compounds and disordered alloys (in the coherent potential approximation), calculation of the enthalpy of mixing and magnetic structure. /Пр/	3	4	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ОПК-3-В2 ПК-1-33 ПК-1-В1 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.3Л2.3Л3. 2 Э1 Э2 Э3			
3.5	Выполнение домашнего задания /Home task preparation /Ср/	3	40	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ОПК-3-В2 УК-1-В1 ПК-1-В1	Л1.1 Л1.3Л2.3Л3. 2 Э1 Э2 Э3 Э4			
3.6	Освоение теоретического материала раздела 3 /Mastering the theoretical material of section 2 /Ср/	3	11	ОПК-3-31 ОПК-3-У1 ОПК-3-В1 ОПК-3-В2 УК-1-У1 УК-1-В1 ПК-1-32 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1 Л1.3Л2.3Л3. 2 Э4			

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	Коллоквиум /Colloquium	ОПК-3-31;УК-1-31;ПК-1-31;ПК-1-32;ПК-1-33	<ol style="list-style-type: none"> 1. Периодические электронные зоны. 2. Периодичность, теорема Блоха и зоны Бриллюэна. 3. Приближение Хартри-Фока. 4. Локальные магнитные моменты и модель Гейзенберга. 5. Единая модель электронного газа. 6. Теорема Хоэнберг-Кона. 7. Уравнения Кона-Шема. 8. Функционалы обмена и корреляции. 9. Приближение локальной плотности (LDA). 10. Приближение локальной спиновой плотности (LSDA). 11. Обобщенные градиентные приближения (GGA) 12. Ограничения LDA и GGA. 13. Электрон в слабом периодическом потенциале. 14. Кристаллы и молекулы. Выбор базисных волновых функций. 15. Теорема Хеллмана Феймана. 16. МТ-приближение (MT) и приближение (ASA) атомной сферы для кристаллических потенциалов. 17. Приближение когерентного потенциала (CPA). 18. Псевдопотенциалы. 19. Метод проектора дополненной волны (метод PAW). 20. Различные способы рассеяния: подход ККР 21. Метод локальносамосогласованных функций Грина (LSGF). 22. Суперчейка подход. 23. Модель неупорядоченных магнитных моментов (DLM). / 1. Periodic electronic zones. 2. Periodicity, Bloch's theorem and Brillouin zones. 3. Hartree-Fock approximation. 4. Local magnetic moments and the Heisenberg model. 5. Unified model of electron gas. 6. Hohenberg-Kohn theorem. 7. Kohn-Shem equations. 8. Exchange and correlation functionals. 9. Local density approximation (LDA). 10. Local spin density approximation (LSDA). 11. Generalized Gradient Approximations (GGA) 12. Limitations of LDA and GGA. 13. Electron in a weak periodic potential. 14. Crystals and molecules. Choice of basic wave functions. 15. Hellman Feyman's theorem. 16. MT approximation (MT) and atomic sphere approximation (ASA) for crystal potentials. 17. Coherent Potential Approximation (CPA). 18. Pseudopotentials. 19. Augmented wave projector method (PAW method). 20. Various Scattering Methods: The KKR Approach 21. Method of locally self-consistent Green's functions (LSGF). 22. Supercell approach. 23. Model of disordered magnetic moments (DLM).
5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (модулю, практике, НИР) - эссе, рефераты, практические и расчетно-графические работы, курсовые работы, проекты и др.			
<p>По курсу предусмотрен экзамен в третьем семестре.</p> <p>По курсу предусмотрена домашнее задание, выполняемое в виде реферата (ПК-1.1-32, ПК-1.1-31, УК-9.2-31, ОПК-5.1-31, ПК-1.1-В2, ПК-1.1-В1, УК-9.2-В1, ОПК-5.1-В1, ПК-1.1-У1, УК-9.2-У1, ОПК-5.1-У1, ОПК-5.1-У2, ПК-1.1-У2, ОПК-5.1-В2)</p> <p>Примерные темы домашнего задания</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Особенности применения метода температурно-зависимого эффективного потенциала (TDEP). 2. Особенности метода метода LDA+U 3. Гибридные обменно-корреляционные функционалы, их преимущества и недостатки. 4. Применение модели неупорядоченных магнитных моментов (DLM). 			

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.
 Пример экзаменационного билета в Приложении.

Пример экзаменационного билета

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	Харрисон У., Сурис Р. А.	Теория твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1972
Л2.2	Марч Н., Янг У., Сампантхар С., Зубарев Д. Н., Плакида Н. М.	Проблема многих тел в квантовой механике	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1969
Л2.3	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 Ю. Х., Кузьмин Ю. М.	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

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.2	Векилов Ю. Х., Кузьмин Ю. М.	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	https://www.vasp.at/wiki/index.php/The_VASP_Manual
Э2	ABINIT Пакет программ первопринципного моделирования	https://docs.abinit.org/tutorial/
Э3	QUANTUM ESPRESSO Пакет программ первопринципного моделирования	https://www.quantum-espresso.org/resources/tutorials
Э4	Введение в теорию функционала плотности	http://master-mcn.u-strasbg.fr/wp-content/uploads/2015/09/DFT.pdf

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 https://elibrary.ru/
И.3	Иностранные базы данных (доступ с IP адресов МИСиС):
И.4	— аналитическая база (индексы цитирования) Web of Science https://apps.webofknowledge.com
И.5	— аналитическая база (индексы цитирования) Scopus https://www.scopus.com/
И.6	— наукометрическая система InCites https://apps.webofknowledge.com
И.7	— научные журналы издательства Elsevier https://www.sciencedirect.com/

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
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
Б-1135	Компьютерный класс:	персональные компьютеры - 30 шт., пакет лицензионных программ MS Office, проектор, 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.

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.