

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной работе

Дата подписания: 27.10.2023 15:15:01

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)

Основы моделирования на атомном уровне

Закреплена за подразделением Кафедра материаловедения полупроводников и диэлектриков

Направление подготовки 22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ

Профиль

Квалификация **Инженер-исследователь**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **4 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 144

в том числе:

аудиторные занятия 51

самостоятельная работа 93

Формы контроля в семестрах:
зачет с оценкой 9

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	9 (5.1)		Итого	
	Неделя 18			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	17	17	17	17
Практические	34	34	34	34
Итого ауд.	51	51	51	51
Контактная работа	51	51	51	51
Сам. работа	93	93	93	93
Итого	144	144	144	144

Программу составил(и):

д.ф.-м.н., проф., Сорокин Павел Борисович

Рабочая программа

Основы моделирования на атомном уровне

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 материаловедения полупроводников и диэлектриков

Протокол от 21.06.2023 г., №12-22/23

Руководитель подразделения Оганов Артем Ромаевич, д.ф.-м.н., профессор

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

1.1	Цель – ознакомить учащихся с теорией квантово-химического моделирования. В курсе рассматриваются различные методы моделирования: теория функционала электронной плотности, приближение сильной связи, эмпирические потенциалы
1.2	Изучивший курс должен уметь оперировать с понятиями области численного моделирования на атомном уровне, знать основы методов, понимать принципы их работы.

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Блок ОП:		Б1.В.ДВ.27
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Методы математической физики	
2.1.2	Физика	
2.1.3	Математика	
2.1.4	Введение в квантовую механику	
2.1.5	Фазовые равновесия и дефекты структуры	
2.1.6	Основы технологии получения материалов	
2.1.7	Процессы получения металлов, сплавов и соединений	
2.1.8	Технология материалов электроники	
2.1.9	Материаловедение	
2.1.10	Материаловедение полупроводников и диэлектриков	
2.1.11	Основы материаловедения и методов исследования материалов	
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	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	Преддипломная практика для выполнения 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	Цифровое материаловедение	

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ПК-3: Способен участвовать в разработке инновационных технологических процессов в области материаловедения и технологии материалов
Знать:
ПК-3-31 Возможности основных современных методов компьютерного моделирования, области их применимости и методы трактовки химических явлений и процессов
Уметь:
ПК-3-У1 Работать со справочной литературой и другими информационными и нормативными материалами в области компьютерных и информационных технологий
Владеть:
ПК-3-В1 Способен осуществлять критический анализ новых материалов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих вычислительных методов, вырабатывать стратегию действий

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	Введение в курс /Лек/	9	1	ПК-3-У1	Л1.1 Л1.5Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2	Лекционное занятие		
1.2	Основы квантовой механики /Лек/	9	2	ПК-3-У1	Л1.2 Л1.4Л2.1Л3. 1	Лекционное занятие		
1.3	Связь в твёрдых телах /Лек/	9	1	ПК-3-У1	Л1.4 Л1.5	Лекционное занятие		
1.4	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	9	15	ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.4 Л1.5Л3.2	Самостоятел ьная работа		
1.5	Решение модельных задач квантовой механики /Пр/	9	8	ПК-3-В1	Л1.1Л2.1 Л2.2	Практическо е занятие		
	Раздел 2. Потенциальная поверхность							
2.1	Общий гамильтониан для конденсированных сред /Лек/	9	1	ПК-3-У1	Л1.2 Л1.4Л2.1	Лекционное занятие		
2.2	Приближение Борна- Оппенгеймера /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.2Л2.1	Лекционное занятие		
2.3	Поверхность потенциальной энергии /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.2 Л1.4 Л1.5Л2.1	Лекционное занятие		
2.4	Методы поиска минимума энергии /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.1 Л1.5Л3.2	Лекционное занятие		
2.5	Базисные функции /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.1	Лекционное занятие		
2.6	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	9	30	ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.4 Л1.5Л2.2Л3. 2	Самостоятел ьная работа		
2.7	Алгоритмы минимизации энергии /Пр/	9	6	ПК-3-В1	Л1.1	Практическо е занятие		
	Раздел 3. Обзор эмпирических, полуэмпирических и ab initio методов							
3.1	Метод Хартри-Фока /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.2 Л1.5Л2.2Л3. 2	Лекционное занятие		
3.2	Полуэмпирические методы /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.5Л2.2Л3. 2	Лекционное занятие	КМ1	Р1
3.3	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	9	12	ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.5Л2.2Л3. 2	Самостоятел ьная работа		
3.4	Практическое применение ab initio и полуэмпирических методов /Пр/	9	8	ПК-3-В1	Л1.1Л2.2Л3. 2	Практическо е занятие		
	Раздел 4. Теория функционала электронной плотности							

4.1	Теория Томаса-Ферми /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.5Л2.2Л3.2	Лекционное занятие		
4.2	Теорема Хоэнберга и Кона /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.5Л2.2Л3.2	Лекционное занятие		
4.3	Обменно-корреляционные функционалы /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.5Л2.2Л3.2	Лекционное занятие		P1
4.4	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	9	18	ПК-3-В1	Л1.5Л3.2	Самостоятельная работа		
4.5	Практическое применение метода теории функционала электронной плотности /Пр/	9	8	ПК-3-В1	Л1.1Л3.2	Практическое занятие		
Раздел 5. Эмпирические потенциалы								
5.1	Парные потенциалы /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.5	Лекционное занятие		
5.2	Многочастичные потенциалы /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.5	Лекционное занятие		
5.3	ML-потенциалы /Лек/	9	1	ПК-3-31	Л1.3 Л1.5	Лекционное занятие	КМ2	P1
5.4	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	9	18	ПК-3-В1	Л1.5	Самостоятельная работа		
5.5	Параметризация эмпирических потенциалов и их практическое применение /Пр/	9	4	ПК-3-В1	Л1.1	Практическое занятие		

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	Контрольная работа №1	ПК-3-У1;ПК-3-31;ПК-3-В1	<ol style="list-style-type: none"> 1. Какие основные принципы квантовой механики лежат в основе моделирования на атомном уровне? 2. Что такое квантовая яма и какие свойства она обладает? 3. Какие особенности имеет атом водорода и какие модели используются для его описания? 4. Что такое общий гамильтониан для конденсированного вещества и как он связан с многоэлектронными системами? 5. Что представляет собой приближение среднего поля и как оно применяется в моделировании многоэлектронных систем? 6. Что такое приближение Борна-Оппенгеймера и как оно используется при описании молекул? 7. Что такое поверхность потенциальной энергии и как она связана с поиском минимума энергии в системе? 8. Какие методы используются для поиска минимума энергии в системах на атомном уровне? 9. Какие существуют методы моделирования на основе эмпирических, полуэмпирических и ab initio подходов? 10. Какие приближения используются в моделировании сильной связи и как они применяются для описания многочастичных систем?

КМ2	Контрольная работа №2	ПК-3-31;ПК-3-У1;ПК-3-В1	<ol style="list-style-type: none"> 1. Что такое метод Слейтера-Костера и как он применяется в моделировании многоэлектронных систем? 2. Что представляет собой теория функционала электронной плотности и как она используется в моделировании атомных и молекулярных систем? 3. Что такое теория Томаса-Ферми и как она связана с моделированием электронных структур? 4. Что представляет собой теория Хоэнберга и Кона и как она применяется в моделировании электронных структур? 5. Что такое самосогласованные уравнения Кона-Шэма и как они используются для описания электронных структур? 6. Что представляет собой приближение локальной электронной плотности (LDA) и как оно применяется в моделировании электронных структур? 7. Что представляет собой обобщенное градиентное приближение (GGA) и как оно отличается от приближения локальной электронной плотности? 8. Что такое гибридные обменно-корреляционные функционалы и как они учитывают взаимодействие ван-дер-ваальса в моделировании систем? 9. Что представляют собой эмпирические потенциалы и как они используются в моделировании атомных и молекулярных систем? 10. Что представляют собой парные и многочастичные потенциалы и как они применяются в моделировании сложных систем?
-----	-----------------------	-------------------------	---

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
P1	Реферат	ПК-3-У1;ПК-3-31	Тема реферата выдаются персонально

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 демонстрации полученных знаний

Студент получает оценку

"отлично" - глубокое понимание студентом теоретических основ методов моделирования на атомном уровне, освоение компетенций, предполагаемых курсом, выполнение практической работы;

"хорошо" - понимание с незначительными неточностями теоретических основ методов моделирования на атомном уровне, освоение компетенций, предполагаемых курсом, выполнение практической работы с незначительными недостатками;

"удовлетворительно" - общее понимание теоретических основ методов моделирования на атомном уровне при некоторых существенных неточностях, освоение компетенций, предполагаемых курсом, выполнение практической работы с существенными недостатками;

"неудовлетворительно" - непонимание теоретических основ методов моделирования на атомном уровне, неосвоение компетенций, предполагаемых курсом, невыполнение практической работы;

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Крашенинин В. И., Газенаур Е. Г., Кузьмина Л. В.	Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам: учебное пособие	Электронная библиотека	Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012
Л1.2	Давыдов А. С.	Квантовая механика: монография	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1973
Л1.3	Ясницкий Л. Н.	Введение в искусственный интеллект: учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по спец. 010100 "Математика"	Библиотека МИСиС	М.: ACADEMIA, 2005

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.4	Киттель Ч., Гусев А. А.	Введение в физику твердого тела: учеб. руководство	Библиотека МИСиС	М.: МедиаСтар, 2006
Л1.5	Крашенинин В. И., Кузьмина Л. В., Газенаур Е. Г.	Квантовая химия: учебное пособие	Электронная библиотека	Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2019

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Неволин В. К.	Квантовая физика и нанотехнологии	Электронная библиотека	Москва: РИЦ Техносфера, 2013
Л2.2	Звонарев С. В., Кортов В. С., Штанг Т. В.	Моделирование структуры и свойств наносистем: учебно-методическое пособие	Электронная библиотека	Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2014

6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1	Киселёв В. В.	Квантовая механика: курс лекций: курс лекций	Электронная библиотека	Москва: МЦНМО, 2009
Л3.2	Кононова З. А., Алтухова С. О.	Компьютерное моделирование в химии: учебное пособие	Электронная библиотека	Липецк: Липецкий государственный педагогический университет им. П.П. Семенова-Тян-Шанского, 2019

6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	Win Pro 10 32-bit/64-bit
-----	--------------------------

6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

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, ПКс 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, ПКс доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus
ФД-Читальный зал	Кабинет для самостоятельной работы	35 посадочных мест, 20 компьютеров для студентов с выходом в Интернет.

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Обучение организуется в соответствии с настоящей программой.

Проведение лекционных занятий и практических работ осуществляется исключительно в аудиториях, обеспеченных мультимедийным оборудованием, с возможностью показа презентаций и видеофильмов.

Проведение аудиторных занятий предусматривает использование в учебном курсе активных и интерактивных технологий:

Дисциплина относится к точным наукам и требует значительного объема самостоятельной работы. Отдельные учебные вопросы выносятся на самостоятельную проработку. При этом организуются групповые и индивидуальные консультации. Качественное освоение дисциплины возможно только при систематической самостоятельной работе.

Подготовка к контрольным работам проводится в часы самостоятельной работы и, при необходимости, в часы консультаций лектора.

По курсу предусмотрен зачет с оценкой. Самостоятельная работа студентов организуется и контролируется путем индивидуального опроса и тестирования студентов во время практических занятий, коллоквиумов, подготовки и написания реферата.

Материалы курса (презентации лекций, рекомендуемая литература, видеоматериалы и др.) могут приводиться в системе LMS Canvas по мере освоения дисциплины.

Перед началом занятий студенты получают график выдачи и сдачи реферата.

Рекомендуется на каждом практическом занятии проводить экспресс опрос (с постановкой оценки) либо тестирование по пройденной теме, с целью установления усвояемости дисциплины.

Рекомендуется проведение защиты реферата в виде краткого доклада с предоставлением иллюстративного материала (презентации) и совместного обсуждения доклада.

Для успешного освоения изучаемой дисциплины для студентов организуются консультации.

При самостоятельной работе целесообразно пользоваться, помимо основной литературы, следующими источниками:

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. 5е изд. М.: Лаборатория знаний", 2021. 495 с.

2. Martin R.M. Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. 1st edition. Cambridge, UK ; New York: Cambridge University Press, 2008. 650 p.

Требования и рекомендации к оформлению реферата:

1. Реферат – оригинальное произведение, основанное на общедоступных источниках.

2. Количество источников в реферате должно быть не менее 10. Если источник взят из сети Интернет, в списке использованных источников следует указывать полностью адрес страницы и дату обращения.

3. Прямые цитаты в тексте должны быть помещены в двойные кавычки («» или ""), в конце цитаты ставится номер ссылки в списке использованных источников.

4. Количество оригинального текста должно быть более 1/2 от объема реферата. Объем заимствований проверяется в системе «Антиплагиат МИСиС».

5. Количество процитированного текста на странице не должно быть более чем 1/2 страницы.

6. Реферат должен состоять из следующих разделов:

- Титульный лист

- Введение (актуальность, постановка задачи)

- Основная часть

- Заключение (выводы)

- Список использованных источников

7. Реферат должен раскрывать тему полностью и не содержать лишней информации.

8. Объем не должен быть меньше 7 и не больше 15 листов А4 вместе с титульным листом. Шрифт 12-14 Times New Roman; полуторный межстрочный интервал; абзац 1,25 см; выравнивание текста - по ширине страницы; выравнивание заголовков – по центру страницы; поля сверху и снизу - 2 см, справа – 1,5 см, слева – 3 см.