

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 27.10.2023 12:14:45

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)

Практическое применение теории функционала электронной плотности

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 **3 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 108

в том числе:

аудиторные занятия 34

самостоятельная работа 74

Формы контроля в семестрах:
зачет с оценкой 11

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	11 (6.1)		Итого	
	УП	РП		
Неделя	18			
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 Павел Борисович

Рабочая программа

Практическое применение теории функционала электронной плотности

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 практикой применения методов 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 современной 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 практикой применения 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.В.ДВ.35
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Квантовая теория твердого тела	
2.1.2	Компьютерные и информационные технологии в науке и производстве	
2.1.3	Материаловедение и технологии перспективных материалов	
2.1.4	Методы исследования характеристик и свойств материалов	
2.1.5	Методы электронной микроскопии для материалов твердотельной электроники	
2.1.6	Основы научно-технического перевода	
2.1.7	Практика научно-технического перевода и редактирования	
2.1.8	Технология получения кристаллов	
2.1.9	Физические основы магнетизма и процессы перемагничивания материалов	
2.1.10	Физические свойства приповерхностных слоев и методы их исследований	
2.1.11	Функциональные наноматериалы	
2.1.12	Химия и технология полимерных материалов	
2.1.13	Атомная и электронная структура поверхности и межфазных границ	
2.1.14	Композиционные материалы	
2.1.15	Конструирование композиционных материалов	
2.1.16	Методы исследования структур и материалов. Часть 2	
2.1.17	Поверхностное модифицирование материалов и защитные покрытия	
2.1.18	Специальные сплавы	
2.1.19	Инженерия поверхности	
2.1.20	Металловедение и термическая обработка металлов	
2.1.21	Методы исследования структур и материалов. Часть 1	
2.1.22	Методы исследования физических свойств полупроводниковых структур	
2.1.23	Наноматериалы	
2.1.24	Сверхтвердые материалы	
2.1.25	Фазовые и структурные изменения при формировании материалов и эпитаксиальных структур	
2.1.26	Физика полупроводниковых приборов	
2.1.27	Физика прочности	
2.1.28	Физика прочности и механические свойства материалов	
2.1.29	Физико-химия металлов и неметаллических материалов	
2.1.30	Физические основы деформации и разрушения	
2.1.31	Материаловедение полупроводников и диэлектриков	
2.1.32	Металловедение инновационных материалов	
2.1.33	Метрология и стандартизация цифровых технологий в материаловедении и металлургии	
2.1.34	Метрология, стандартизация и технические измерения	
2.1.35	Метрология, стандартизация и технические измерения в электронике	
2.1.36	Основы материаловедения и методов исследования материалов	
2.1.37	Разработка новых материалов	
2.1.38	Фазовые равновесия и дефекты структуры	

2.1.39	Физика диэлектриков
2.1.40	Физика полупроводников
2.1.41	Введение в квантовую теорию твердого тела
2.1.42	Дефекты кристаллической решетки
2.1.43	Компьютеризация эксперимента
2.1.44	Материалы наукоемких технологий
2.1.45	Основы дизайна металлических материалов
2.1.46	Планирование и организация научно-исследовательской работы
2.1.47	Современные проблемы материаловедения
2.1.48	Теория поверхностных явлений
2.1.49	Электроника
2.1.50	Методы математической физики
2.1.51	Физика
2.1.52	Химия
2.1.53	Физические свойства материалов
2.1.54	Физика металлов
2.1.55	Материаловедение
2.1.56	Введение в квантовую механику
2.1.57	Кристаллография
2.1.58	Атомное строение фаз
2.1.59	Биоорганическая химия
2.1.60	Высокотемпературные керамические материалы
2.1.61	Жаропрочные и радиационно-стойкие материалы
2.1.62	Математическое и компьютерное моделирование материалов и процессов электроники
2.1.63	Методы исследования макро- и микроструктуры материалов
2.1.64	Методы непараметрической статистики
2.1.65	Некоторые главы кристаллохимии
2.1.66	Объемные наноматериалы
2.1.67	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности
2.1.68	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности
2.1.69	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности
2.1.70	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности
2.1.71	Процессы получения и обработки сверхтвердых материалов
2.1.72	Структура и технологичность сплавов
2.1.73	Физико-химия эволюции твердого вещества
2.1.74	Ядерно-спектроскопические и синхротронные методы исследований
2.1.75	Аморфные, микро- и нанокристаллические материалы
2.1.76	Биофизика
2.1.77	Высокотемпературные и сверхтвердые функциональные и конструкционные материалы
2.1.78	Метрология и испытания функциональных материалов
2.1.79	Тензорные методы в кристаллофизике
2.1.80	Физическое материаловедение сплавов с особыми магнитными свойствами, часть 1. Магнитно-мягкие сплавы
2.1.81	Физическое материаловедение сплавов с особыми магнитными свойствами, часть 2. Магнитно-твердые сплавы
2.1.82	Биохимия наноматериалов
2.1.83	Технологии материалов с особыми физическими свойствами
2.1.84	Физика магнитных явлений
2.1.85	Диффузия и диффузионно-контролируемые процессы
2.1.86	Методы исследования материалов
2.1.87	Метрология и технические измерения функциональных материалов
2.1.88	Материалы альтернативной энергетики
2.1.89	Планирование научного эксперимента
2.1.90	Теория симметрии

2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:
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

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

Знать:

ПК-1-31 Основы теории моделирования из первых принципов: теории функционала электронной плотности

Уметь:

ПК-1-У1 Применять теорию функционала электронной плотности, для расчета, интерпретации и предсказания строения и физико-химических свойств твердых тел

Владеть:

ПК-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							
1.1	Историческая справка /Лаб/	11	1	ПК-1-31	Л1.1 Л1.2 Л1.3			
1.2	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	11	1					
	Раздел 2. Оптимальная атомная геометрия							
2.1	Термодинамическая стабильность /Лаб/	11	1	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.2 Л1.3			
2.2	Дефекты /Лаб/	11	2	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.2 Л1.3			
2.3	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	11	10					
2.4	Получение оптимальной атомной структуры и энергии когезии кристалла /Пр/	11	4	ПК-1-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Э1			Р1
	Раздел 3. Механические свойства твёрдых тел							

3.1	Кривые напряжение-деформации /Лаб/	11	1	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.2			
3.2	Упругие постоянные /Лаб/	11	1	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.2			
3.3	Твёрдость /Лаб/	11	1	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.2			
3.4	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	11	14	ПК-1-31				
3.5	Проведение расчёта упругих констант /Пр/	11	5	ПК-1-В1	Л1.2 Э1			Р2
	Раздел 4. Фононы							
4.1	Зонная картина фононов и плотность фононных состояний /Лаб/	11	1	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.2			
4.2	Коэффициент теплового расширения /Лаб/	11	1	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.2 Л1.3			
4.3	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	11	10	ПК-1-31	Л1.1 Л1.2 Л1.3			
	Раздел 5. Электронные свойства твёрдых тел							
5.1	Зонная структура, плотность электронных состояний /Лаб/	11	1	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.2			
5.2	Эффективная масса /Лаб/	11	1	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.2			
5.3	Подвижность и концентрация носителей заряда /Лаб/	11	1	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.2			
5.4	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	11	15	ПК-1-31				
5.5	Проведение расчёта зонной структуры /Пр/	11	4	ПК-1-В1	Л1.2 Э1			Р3
	Раздел 6. Фазовые переходы							
6.1	Фазовая диаграмма /Лаб/	11	2	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.2			
6.2	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	11	5	ПК-1-31				
6.3	Проведение расчёта фазовой диаграммы /Пр/	11	4	ПК-1-В1	Л1.1 Л1.2			Р4

	Раздел 7. Общие рекомендации по проведению точного квантово-химического моделирования							
7.1	Общие рекомендации по проведению точного квантово-химического моделирования /Ср/	11	1	ПК-1-У1	Л1.1			
7.2	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	11	4					
	Раздел 8. Химические реакции							
8.1	Метод подталкивания упругой ленты (НЕВ) /Лаб/	11	1	ПК-1-У1 ПК-1-31	Л1.1 Л1.2 Л1.3			
8.2	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	11	4	ПК-1-31				
	Раздел 9. Границы раздела, поверхности и края							
9.1	Энергия поверхности, метод Вульфа /Лаб/	11	1	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.2			
9.2	Границы раздела /Лаб/	11	1	ПК-1-31 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.2		КМ1	
9.3	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку /Ср/	11	10					

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	ПК-1-31	Термодинамическая стабильность, энергия образования дефектов, коэффициенты диффузия, электроотрицательность, кривые напряжение-деформации, упругие постоянные, трение, твёрдость, коэффициент теплового расширения, теплоёмкость, зонная картина фононов, плотность электронных состояний, зонная структура, метод свёртки зон, электростатический потенциал, работа выхода, эффективная масса, подвижность носителей заряда, концентрация носителей заряда, фазовая диаграмма, энергия поверхности, методики предсказания формы кристалла, энергия образования поверхности, границы раздела, СТМ изображения поверхности, метод подталкивания упругой ленты, композитные материалы, особенности точного квантово-химического моделирования.

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	Практическая работа №1	ПК-1-В1;ПК-1-У1	Моделирование атомной структуры и стабильности кристаллов
P2	Практическая работа №2	ПК-1-У1;ПК-1-В1	Моделирование упругих свойств кристаллов
P3	Практическая работа №3	ПК-1-У1;ПК-1-В1	Моделирование электронных свойств кристаллов
P4	Практическая работа №4	ПК-1-У1;ПК-1-В1	Моделирование фазовой диаграммы 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:

"отлично" - глубокое понимание студентом теоретических основ методов моделирования на атомном уровне, освоение компетенций, предполагаемых курсом, отличное выполнение контрольной работы, выполнение всех практических работ;
 "хорошо" - понимание с незначительными неточностями теоретических основ методов моделирования на атомном уровне, освоение компетенций, предполагаемых курсом, выполнение контрольной работы с незначительными недостатками, выполнение всех практических работ;
 "удовлетворительно" - общее понимание теоретических основ методов моделирования на атомном уровне при некоторых существенных неточностях, освоение компетенций, предполагаемых курсом, выполнение контрольной работы с существенными недостатками, выполнение менее половины всех практических работ;
 "неудовлетворительно" - непонимание теоретических основ методов моделирования на атомном уровне, неосвоение компетенций, предполагаемых курсом, невыполнение контрольной работы, невыполнение 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	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	Киттель Ч.	Введение в физику твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1978
Л1.3	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.)	https://gitlab.com/siesta-project/siesta/-releases/v4.1.5/downloads/siesta.pdf
----	--------------------------------------	---

6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	Win Pro 10 32-bit/64-bit
П.2	Microsoft Office

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 Компьютерный класс	Учебная аудитория для проведения практических занятий:	экран, проектор, доска, комплект учебной мебели на 30 посадочных мест, персональные компьютеры, доступ к ЭИОС университета LMS Canvas, лицензионные программы MS Teams, MS Office
ФД-Читальный зал	Кабинет для самостоятельной работы	35 посадочных мест, 20 компьютеров для студентов с выходом в Интернет.

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.