



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»



УТВЕРЖДАЮ
Директор ИЕиС
И.Ю. Мезин

16.03.2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

***МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
НАНОСТРУКТУРНЫХ ОБЪЕКТОВ***

Направление подготовки (специальность)
03.03.02 ФИЗИКА

Направленность (профиль/специализация) программы
Информационные технологии в физике процессов и наноструктур

Уровень высшего образования - бакалавриат
Программа подготовки - академический бакалавриат

Форма обучения
очная

Институт/ факультет	Институт естествознания и стандартизации
Кафедра	Физики
Курс	4
Семестр	7

Магнитогорск
2019 год

Рабочая программа составлена на основе ФГОС ВО по направлению подготовки 03.03.02 ФИЗИКА (уровень бакалавриата) (приказ Минобрнауки России от 07.08.2014 г. № 937)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Физики
12.03.2020, протокол № 6

Зав. кафедрой  М.Б. Аркулис

Рабочая программа одобрена методической комиссией ИЕиС
16.03.2020 г. протокол № 8

Председатель  И.Ю. Мезин

Рабочая программа составлена:

доцент кафедры Физики, канд. техн. наук  А.В. Колдин

Рецензент:

зав. кафедрой ВТиП, д-р техн. наук  О.С. Логунова

Лист актуализации рабочей программы

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2020 - 2021 учебном году на заседании кафедры Физики

Протокол от 01 09 2020г. № 1
Зав. кафедрой _____ М.Б. Аркулис

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2021 - 2022 учебном году на заседании кафедры Физики

Протокол от _____ 20__ г. № __
Зав. кафедрой _____ М.Б. Аркулис

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2022 - 2023 учебном году на заседании кафедры Физики

Протокол от _____ 20__ г. № __
Зав. кафедрой _____ М.Б. Аркулис

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2023 - 2024 учебном году на заседании кафедры Физики

Протокол от _____ 20__ г. № __
Зав. кафедрой _____ М.Б. Аркулис

1 Цели освоения дисциплины (модуля)

Целями освоения дисциплины «Моделирование структуры и физических свойств наноструктурных объектов», в соответствии с требованиями «Федерального государственного образовательного стандарта ВО по направлению подготовки 03.03.02 Физика (уровень бакалавриата)», утвержденного 07.08.2014 г. (приказ № 937), являются:

1) подготовка студентов по дисциплине в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 03.03.02 Физика;

2) формирование необходимых компетенций для анализа и решения современных научных и технических проблем, связанных с использованием методов моделирования и основ физики наноструктур в науке и технике;

3) овладение необходимым и достаточным уровнем общекультурных и профессиональных компетенций в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 03.03.02 «Физика».

2 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина Моделирование структуры и физических свойств наноструктурных объектов входит в вариативную часть учебного плана образовательной программы.

Для изучения дисциплины необходимы знания (умения, владения), сформированные в результате изучения дисциплин/ практик:

Исследование структуры и свойств углеродных наноструктур

Моделирование механических свойств твердых тел

Вычислительная физика

Физика углеродных наноструктур

Основы физики кристаллических структур

Симметрия и физические свойства кристаллов и нанокристаллических структур

Знания (умения, владения), полученные при изучении данной дисциплины будут необходимы для изучения дисциплин/практик:

Моделирование колебательных состояний углеродных наноструктур

Теоретическая физика

Спектроскопические методы исследования

3 Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля) и планируемые результаты обучения

В результате освоения дисциплины (модуля) «Моделирование структуры и физических свойств наноструктурных объектов» обучающийся должен обладать следующими компетенциями:

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения
	ОПК-2 способностью использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей
Знать	- простейшие способы численного решения систем линейных дифференциальных уравнений (метод Эйлера); - граничные условия, накладываемые на систему уравнений, методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений; - методы решения систем дифференциальных уравнений в частных производных

Уметь	<ul style="list-style-type: none"> - применять численные методы для решения краевых задач; применять численные методы для решения задач моделирования; - оценивать погрешности аппроксимации и точности приближенных решений; - делать правильные выводы из сопоставления результатов аналитической теории и численного эксперимента; - применять методы Эйлера и Рунге-Кутты больших порядков для решения систем уравнений
Владеть	<ul style="list-style-type: none"> - практическими навыками решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений; - методикой составлений математических моделей функционирования наноструктурных объектов, способами решения полученных систем уравнений, навыками анализа полученных результатов
ОПК-5 способностью использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией	
Знать	<ul style="list-style-type: none"> - основные способы использования распространенных программных продуктов; - основные способы использования специализированного программного обеспечения для решения задач моделирования наноструктурных объектов
Уметь	<ul style="list-style-type: none"> - применять основные распространенные программные продукты для решения профессиональных задач; - применять специализированное программное обеспечение в профессиональной деятельности
Владеть	<ul style="list-style-type: none"> - навыками использования программных продуктов для решения конкретных задач, базовыми навыками программирования; - навыками использования и создания специализированного программного обеспечения для решения профессиональных задач
ПК-5 способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований	
Знать	<ul style="list-style-type: none"> - основные приёмы и методы обработки баз информации; - принципы и методы научного исследования; - основы регистрации, обработки, представления численных и графических данных; - основные приёмы и методы обработки баз информации; - принципы и методы научного исследования; основы регистрации, обработки, представления численных и графических данных, а так же программных сред для осуществления выше перечисленных процессов сбора и представления информации; - методику планирования многофакторного эксперимента

Уметь	<ul style="list-style-type: none"> - применять полученные знания для обработки, анализа и синтеза общефизической информации; - представлять полученные значения измеряемых параметров с учётом погрешности измерений; делать сообщения и доклады на тему из области физического исследования; - делать сообщения и доклады на тему из области физического исследования; излагать на русском и иностранном языке содержание прочитанного или прослушанного материала на иностранном языке, научно-технической литературы; применять методы и алгоритмы планирования и постановки физического эксперимента
Владеть	<ul style="list-style-type: none"> - современной научной парадигмой, имеет системное представление о динамике развития избранной области научной и профессиональной деятельности; - наследием отечественной научной мысли, направленной на решение общенаучных проблем; - способностью к анализу, обобщению информации, постановке целей и выбору путей их достижения

4. Структура, объём и содержание дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц 108 акад. часов, в том числе:

- контактная работа – 36,1 акад. часов;
- аудиторная – 36 акад. часов;
- внеаудиторная – 0,1 акад. часов
- самостоятельная работа – 71,9 акад. часов;

Форма аттестации - зачет с оценкой

Раздел/ тема дисциплины	Семестр	Аудиторная контактная работа (в акад. часах)			Самостоятельная работа студента	Вид самостоятельной работы	Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	Код компетенции
		Лек.	лаб. зан.	практ. зан.				
1. Молекулярно-механические методы моделирования наноструктурных объектов								
1.1 Описание методов молекулярной механики, потенциалы взаимодействия в молекулярной механике	7			8/2И	16	Самостоятельное изучение учебной и научно литературы	Устный опрос (собеседование)	ОПК-2, ОПК-5, ПК-5
1.2 Методы решения задач молекулярной механики, методы минимизации энергии и интегрирования				12/8И	24	Подготовка к практическому занятию	Компьютерные лабораторные работы	ОПК-2, ОПК-5, ПК-5
Итого по разделу				20/10И	40			
2. Первопринципные и полуэмпирические методы моделирования наноструктур								
2.1 Описание первопринципных методов и используемых приближений	7			8/2И	16	Подготовка докладов по заранее обозначенным в рабочей программе дисциплины темам	Устный опрос (собеседование)	ОПК-2, ОПК-5, ПК-5
2.2 Описание полуэмпирических методов и используемых приближений				8/2И	15,9	Подготовка докладов по заранее обозначенным в рабочей программе дисциплины темам	Устный опрос (собеседование)	ОПК-2, ОПК-5, ПК-5
Итого по разделу				16/4И	31,9			
Итого за семестр				36/14И	71,9		зач	
Итого по дисциплине				36/14И	71,9		зачет с оценкой	ОПК-2,ОПК-5,ПК-5

5 Образовательные технологии

Результат освоения дисциплины «Моделирование структуры и физических свойств наноструктурных объектов» – формирование у студентов компетенций, представляющих собой динамичную совокупность знаний, умений, владений, способностей и личностных качеств, которую студент может продемонстрировать после завершения данной части образовательной программы. Для формирования этих компетенций и реализации предусмотренных видов учебной работы, в учебном процессе в качестве образовательных технологий используются традиционная и модульно-компетентностная технологии.

Учебные занятия проводятся в виде практических занятий.

В течение практикума студент проводит численный эксперимент по моделированию структуры и свойств наноматериалов с помощью как готовых программных продуктов, так и программ написанных самостоятельно.

6 Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Представлено в приложении 1.

7 Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

Представлены в приложении 2.

8 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

а) Основная литература:

1. Рамбиди Н. Г. Физические и химические основы нанотехнологий [Электронный ресурс] / Н. Г. Рамбиди, А. В. Березкин. – М.: Физматлит, 2009. – 456 с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/view/book/2291/> -. Загл. с экрана. – ISBN 978-5-9221-0988-8

б) Дополнительная литература:

1. Дзидзигури Э.Л. Процессы получения наночастиц и наноматериалов. Нанотехнологии [Электронный ресурс] / Э. Л. Дзидзигури, Е. Н. Сидорова. – М.: МИСИС, 2012. – 71 с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/view/book/47445/> -. Загл. с экрана. – ISBN 978-5-87623-605-0

2. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии [Электронный ресурс] / А. И. Гусев. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2009. – 416 с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/view/book/2173/> -. Загл. с экрана. – ISBN 978-5-9221-0582-8

в) Методические указания:

1. Мавринский В.В. Физика углеродных материалов [Текст]: учебно-методическое пособие / В.В. Мавринский, Д.М. Долгушин, МГТУ. 2014. -74с.

г) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Программное обеспечение

Наименование ПО	№ договора	Срок действия лицензии
MS Windows 7 Professional(для классов)	Д-1227-18 от 08.10.2018	11.10.2021
MS Office 2007 Professional	№ 135 от 17.09.2007	бессрочно

Borland Turbo Delphi	№112301 от 23.11.2005	бессрочно
ABC Pascal	свободно распространяемое	бессрочно
MathCAD v.15 Education University	Д-1662-13 от 22.11.2013	бессрочно

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Название курса	Ссылка
Электронные ресурсы библиотеки МГТУ им. Г.И. Носова	http://magtu.ru:8085/marcweb2/Default.asp

9 Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Материально-техническое обеспечение дисциплины включает:

Материально-техническое обеспечение дисциплины включает:

Учебные аудитории для проведения практических занятий. Оснащение: доска, мультимедийный проектор, экран.

Аудитории для лабораторной и самостоятельной работы обучающихся. Оснащение: персональные компьютеры с выходом в интернет и доступом в электронную образовательную среду университета.

Приложение 1

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Примеры тем лабораторных заданий:

1. Моделирование структуры и свойств 1-компонентных наночастиц
2. Моделирование структуры и свойств 2-компонентных наночастиц
3. Моделирование самоорганизации наночастиц
4. Моделирование процесса спекания монослойных и многослойных структур
5. Моделирование микроструктуры методом плотной упаковки сфер
6. Моделирование фрактальных агрегатов
7. Моделирование диффузии идеального газа через монослойную мембрану
8. Моделирование диффузии идеального газа через многослойную мембрану
9. Моделирование диффузии по фрактальному агрегату

Список вопросов для самопроверки:

1. Какие математические методы можно отнести к квантовомеханическим расчетам «из первых принципов»?
2. В чем суть квантово-теоретического подхода расчетов «из первых принципов»?
3. В чем сходство и различия метода самосогласованного поля и теории функционала плотности?
4. Перечислите наиболее широко используемые потенциалы взаимодействий частиц.
5. Опишите методы моделирования молекулярных систем.
6. Какие многочастичные потенциалы вам известны?
7. Какие полуэмпирические методы вы знаете?
8. В чем отличие метода молекулярной механики от квантовомеханических расчетов «из первых принципов»?
9. В чем суть метода молекулярной динамики?
10. Для каких целей может применяться моделирование методом молекулярной динамики?
11. Опишите основные этапы кинетического метода Монте-Карло.
12. Приведите примеры моделей кластерных систем.
13. Что такое «фрактальные кластеры» и какие модели их формирования вы знаете?
14. Какую информацию дают нам модели атомной подвижности?
15. Какие модели транспортно-диффузионного переноса вы знаете?
16. Перечислите токи, возникающие в приповерхностном слое образца после облучения его поверхности электронным пучком.
17. Какие процессы сопровождают транспорт носителей заряда в облученных материалах?
18. Объясните физическую модель транспорта электронов в материале.
19. Назовите особенности наноструктурного состояния, влияющие на процессы переноса заряда в материалах

Перечень вопросов к зачету:

1. Физические основы метода молекулярной динамики
2. Области применения молекулярной динамики
3. Ограничения МД, обусловленные выбором межатомного потенциала
4. Ограничения МД, обусловленные временем интегрирования и размерами ансамбля
5. Построение межатомных потенциалов
6. Приближение Борна-Оппенгеймера
7. потенциал твёрдых сфер
8. Потенциал Леннарда – Джонса

9. Потенциал Морзе
10. Потенциал Букингема
11. Экранированный кулоновский потенциал
12. Проблемы двухчастичных потенциалов
13. Многочастичные потенциалы для металлов
14. Эмпирические потенциалы межатомного взаимодействия для ковалентных систем
15. Потенциал Стиллинджера Вебера
16. Потенциалы Терзоффа
17. Потенциалы для описания взаимодействия между атомами углерода
18. Силы дальнего действия
19. Молекулярная динамика из первых принципов
20. Основные алгоритмы метода молекулярной динамики
21. Моделирование физической системы
22. Обрезание потенциала и коррекция дальнего диапазона
23. Периодические граничные условия
24. Критерий минимального образа
25. Геометрии с поверхностями
26. Алгоритм интегрирования уравнений движения по времени
27. Алгоритм Верлета
28. Алгоритм предиктор-корректор.

Методические рекомендации для самостоятельной работы студентов

Подготовка к зачету

Перед началом подготовки к зачету необходимо просмотреть весь материал и отложить тот, что хорошо знаком, а начинать учить незнакомый, новый

Начинай готовиться к зачету заранее, понемногу, по частям, сохраняя спокойствие. Составь план на каждый день подготовки, необходимо четко определить, что именно сегодня будет изучаться. А также необходимо определить время занятий с учетом ритмов организма.

К трудно запоминаемому материалу необходимо возвращаться несколько раз, просматривать его в течение нескольких минут вечером, а затем еще раз - утром.

Очень полезно составлять планы конкретных тем и держать их в уме, а не зазубривать всю тему полностью «от» и «до». Можно также практиковать написание вопросов в виде краткого, тезисного изложения материала.

Заучиваемый материал лучше разбить на смысловые куски, стараясь, чтобы их количество не превышало семи. Смысловые куски материала необходимо укрупнять и обобщать, выражая главную мысль одной фразой. Текст можно сильно сократить, представив его в виде схемы

Пересказ текста своими словами приводит к лучшему его запоминанию, чем многократное чтение, поскольку это активная, организованная целью умственная работа

Методические указания по выполнению домашнего задания рекомендуется следовать следующему общему алгоритму:

1. Проработать конспект лекции на предмет выявления непонятных моментов те-мы.
2. В случае наличия непонятных моментов сформулировать вопросы.
3. Найти и изучить дополнительный материал по теме, используя рекомендованную литературу и электронные ресурсы учебных пособий в сети Интернет.
4. Ответить на возникшие в ходе изучения темы вопросы.
5. Выписать трактовки основных понятий, законов, принципов и т.п. по теме лекции.

6. Из перечня вопросов к зачету выбрать те, которые отражают содержание лекции.
7. Найти ответы на эти вопросы в тексте лекций и дополнительном материале.
8. Оформить материал в письменном виде

Подготовка к выполнению лабораторной работы

Лабораторные работы являются одним из видов практического обучения. Их цель – закрепление теоретических знаний, проверка на опыте некоторых положений теории и законов, приобретение практических навыков, проведении эксперимента, использовании простейших приборов и аппаратов.

Задание на работу выдается за несколько дней до ее выполнения. Для качественного выполнения лабораторных работ студентам необходимо:

- 1) повторить теоретический материал по конспекту и учебнику (согласно списку литературы)
- 2) ознакомиться с описанием лабораторной работы:
- 3) в специальной рабочей тетради записать название и номер работы, вычертить таблицы для записи показаний приборов и результатов расчета, подготовить миллиметровую бумагу, если требуются графические построения и т.д.
- 3) выяснив цель работы, четко представить себе поставленную задачу и способы ее достижения, продумать ожидаемые результаты опытов
- 4) сделать предварительный домашний расчет, если требуется в задании
- 5) ответить устно и письменно на контрольные вопросы.
- 6) Соблюдать основные правила безопасности при работе в лаборатории.

ПРАВИЛА ВЫПОЛНЕНИЯ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

1. За каждой лабораторной установкой работает не более 2х студентов. Группа разбивается на подгруппы из 2х человек обычно по желанию студентов. Подгруппы фиксируются в журнале преподавателем.

2. При опоздании студента на ЛР:

- менее 15 мин: студент допускается в лабораторию;
- более 15 мин: студент допускается в лабораторию с соответствующей отметкой в журнале группы. К следующей ЛР студент допускается при наличии допуска из деканата с указанием причины получения допуска;

3. Во время ЛР в лаборатории могут находиться только сотрудники кафедры и студенты из соответствующей группы по расписанию. Обязательно присутствие хотя бы одного преподавателя или сотрудника кафедры.

4. Студент допускается преподавателем к выполнению лабораторной работы только после:

- проведения инструктажа по технике безопасности и подписи получившего и проводившего инструктаж в журнале группы;
- при наличии оформленного журнала (смотри «Требования к оформлению журнала для ЛР»). При отсутствии или не полностью заполненном журнале ЛР:
 - проставляется соответствующая отметка в журнале группы;
 - студент готовит журнал в лаборатории;
 - при наличии времени студент допускается к выполнению ЛР (время начала выполнения ЛР в этом случае проставляется в журнале).

Готовый журнал подписывается преподавателем, также делается соответствующая отметка в журнале группы.

5. Студенты выполняют опыты в соответствии с инструкцией по технике безопасности.

6. В ходе выполнения ЛР преподаватель отвечает на все вопросы студентов по теме ЛР.

7. В ходе ЛР в журнал заносятся:

- исходные параметры (характеристики опытной установки, атмосферные данные, точность измерительного оборудования и т.п.);
- измеряемые параметры;
- условия опытов;
- результаты вычислений (в том числе промежуточные и черновые).

8. После снятия замеров, проведения необходимых расчетов и построения графиков, студент должен представить полученные результаты преподавателю на подпись. Также делается соответствующая отметка в журнале группы.

Подготовка к сдаче лабораторной работы

Для защиты лабораторной работы необходимо заполнить отчет о ЛР

2. Защита выполненной лабораторной работы проводится:

- для 4хчасовых ЛР: в часы данной ЛР в соответствии с расписанием;
- для 2хчасовых ЛР: в этот или другие дни в часы в соответствии с расписанием.

3. Защита выполненной лабораторной работы проводится тому же преподавателю, с кем проходило её выполнение. Допускается сдача ЛР лектору кафедры

4. Требования при защите ЛР:

4.1. Преподаватель оценивает ЛР в соответствии с программой курса и проставляет оценку в журнале ЛР и в журнале группы.

4.2. Преподаватель вправе отказать в приеме ЛР по личным причинам.

4.3. Преподаватель обязан принять ЛР при:

- наличии журнала ЛР, оформленного в соответствии с «Требования к оформлению журнала для ЛР»;
- личном выполнении студентом ЛР;
- совпадении результатов опытов с контрольными замерами с точностью до 20 % или до отдельно указанной в конкретной ЛР точности.

- письменном верном ответе на контрольные (тестовые) вопросы из утвержденного кафедрой списка, написанном в присутствии преподавателя.

Приложение 2

«Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации»

По данной дисциплине предусмотрены различные виды контроля результатов обучения: текущий контроль (проверка выполнения лабораторных заданий), итоговый контроль в виде зачета.

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
ОПК-2 способностью использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей		
Знать	<ul style="list-style-type: none"> - простейшие способы численного решения систем линейных дифференциальных уравнений (метод Эйлера); - граничные условия, накладываемые на систему уравнений, методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений; - методы решения систем дифференциальных уравнений в частных производных 	<p style="text-align: center;"><i>Перечень вопросов для подготовки к зачету:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> 29. Физические основы метода молекулярной динамики 30. Области применения молекулярной динамики 31. Ограничения МД, обусловленные выбором межатомного потенциала 32. Ограничения МД, обусловленные временем интегрирования и размерами ансамбля 33. Построение межатомных потенциалов 34. Приближение Борна-Оппенгеймера 35. потенциал твёрдых сфер 36. Потенциал Леннарда – Джонса 37. Потенциал Морзе 38. Потенциал Букингема 39. Экранированный кулоновский потенциал Проблемы двухчастичных потенциалов
Уметь	<ul style="list-style-type: none"> - применять численные методы для решения краевых задач; применять численные методы для решения задач моделирования; - оценивать погрешности аппроксимации и точности приближенных решений; - делать правильные выводы из сопоставления результатов аналитической теории и численного эксперимента; 	<p>Темы лабораторных работ</p> <ul style="list-style-type: none"> 10. Моделирование структуры и свойств 1-компонентных наночастиц 11. Моделирование структуры и свойств 2-компонентных наночастиц 12. Моделирование самоорганизации наночастиц

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
	- применять методы Эйлера и Рунге-Кутты больших порядков для решения систем уравнений	
Владеть	<p>практическими навыками решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений;</p> <p>- методикой составлений математических моделей функционирования наноструктурных объектов, способами решения полученных систем уравнений, навыками анализа полученных результатов</p>	<p>Вопросы для самопроверки:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Какие математические методы можно отнести к квантовомеханическим расчетам «из первых принципов»? 2. В чем суть квантово-теоретического подхода расчетов «из первых принципов»? 3. В чем сходство и различия метода самосогласованного поля и теории функционала плотности? 4. Перечислите наиболее широко используемые потенциалы взаимодействий частиц. 5. Опишите методы моделирования молекулярных систем. 6. Какие многочастичные потенциалы вам известны? 7. Какие полуэмпирические методы вы знаете?
<p>ОПК-5 способностью использовать свободное владение профессионально-профилированными знаниями в области компьютерных технологий для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами направленности</p>		
Знать	<p>- основные способы использования распространенных программных продуктов;</p> <p>- основные способы использования специализированного программного обеспечения для решения задач моделирования наноструктурных объектов</p>	<p><i>Перечень вопросов для подготовки к зачету:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Многочастичные потенциалы для металлов 2. Эмпирические потенциалы межатомного взаимодействия для ковалентных систем 3. Потенциал Стиллинджера Вебера 4. Потенциалы Терзоффа 5. Потенциалы для описания взаимодействия между атомами углерода 6. Силы дальнего действия

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
Уметь	<ul style="list-style-type: none"> - применять основные распространенные программные продукты для решения профессиональных задач; - применять специализированное программное обеспечение в профессиональной деятельности 	<p>Темы лабораторных работ</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Моделирование процесса спекания монослойных и многослойных структур 2. Моделирование микроструктуры методом плотной упаковки сфер 3. Моделирование фрактальных агрегатов
Владеть	<ul style="list-style-type: none"> - навыками использования программных продуктов для решения конкретных задач, базовыми навыками программирования; - навыками использования и создания специализированного программного обеспечения для решения профессиональных задач 	<ol style="list-style-type: none"> 1. В чем отличие метода молекулярной механики от квантовомеханических расчетов «из первых принципов»? 2. В чем суть метода молекулярной динамики? 3. Для каких целей может применяться моделирование методом молекулярной динамики? 4. Опишите основные этапы кинетического метода Монте-Карло. 5. Приведите примеры моделей кластерных систем. 6. Что такое «фрактальные кластеры» и какие модели их формирования вы знаете? 7. Какую информацию дают нам модели атомной подвижности?
ПК-5 способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований		
Знать	<ul style="list-style-type: none"> - основные приёмы и методы обработки баз информации; - принципы и методы научного исследования; - основы регистрации, обработки, представления численных и графических данных; - основные приёмы и методы обработки баз информации; - принципы и методы научного исследования; основы регистрации, обработки, представления 	<p style="text-align: center;"><i>Перечень вопросов для подготовки к зачету:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Молекулярная динамика из первых принципов 2. Основные алгоритмы метода молекулярной динамики 3. Моделирование физической системы 4. Обрезание потенциала и коррекция дальнего диапазона 5. Периодические граничные условия 6. Критерий минимального образа 7. Геометрии с поверхностями 8. Алгоритм интегрирования уравнений движения по времени 9. Алгоритм Верлета 10. Алгоритм предиктор-корректор.

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
	<p>численных и графических данных, а так же программных сред для осуществления выше перечисленных процессов сбора и представления информации;</p> <p>- методику планирования многофакторного эксперимента</p>	
Уметь	<p>- применять полученные знания для обработки, анализа и синтеза общефизической информации;</p> <p>- представлять полученные значения измеряемых параметров с учётом погрешности измерений; делать сообщения и доклады на тему из области физического исследования;</p> <p>- делать сообщения и доклады на тему из области физического исследования; излагать на русском и иностранном языке содержание прочитанного или прослушанного материала на иностранном языке, научно-технической литературы; применять методы и алгоритмы планирования и постановки физического эксперимента</p>	<p>Темы лабораторных работ</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Моделирование диффузии идеального газа через монослойную мембрану 2. Моделирование диффузии идеального газа через многослойную мембрану 3. Моделирование диффузии по фрактальному агрегату
Владеть	<p>- современной научной парадигмой, имеет системное представление о динамике развития избранной области научной и профессиональной деятельности;</p> <p>- наследием отечественной научной мысли, направленной на решение общенаучных</p>	<p>Вопросы для самопроверки:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Какие модели транспортно-диффузионного переноса вы знаете? 2. Перечислите токи, возникающие в приповерхностном слое образца после облучения его поверхности электронным пучком. 3. Какие процессы сопровождают транспорт носителей заряда в облученных материалах? 4. Объясните физическую модель транспорта электронов в материале.

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
	проблем; - способностью к анализу, обобщению информации, постановке целей и выбору путей их достижения	5. Назовите особенности наноструктурного состояния, влияющие на процессы переноса заряда в материалах

Критерии оценки (в соответствии с формируемыми компетенциями и планируемыми результатами обучения):

– на оценку **«отлично»** – студент должен показать высокий уровень знаний не только на уровне воспроизведения и объяснения информации, но и интеллектуальные навыки решения проблем и задач, нахождения уникальных ответов к проблемам, оценки и вынесения критических суждений;

– на оценку **«хорошо»** – студент должен показать знания не только на уровне воспроизведения и объяснения информации, но и интеллектуальные навыки решения проблем и задач, нахождения уникальных ответов к проблемам;

– на оценку **«удовлетворительно»** – студент должен показать знания на уровне воспроизведения и объяснения информации, интеллектуальные навыки решения простых задач;

– на оценку **«неудовлетворительно»** – студент не может показать знания на уровне воспроизведения и объяснения информации, не может показать интеллектуальные навыки решения простых задач.