

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

Компьютерное моделирование материалов

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки :
Фундаментальная и прикладная физика

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
С.Н. Филимонов

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2025

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-2 – Способен проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные;

ПК-1 – Способен проводить научные исследования в выбранной области с использованием современных экспериментальных и теоретических методов, а также информационных технологий;

ПК-3 – Способен разрабатывать алгоритмы и программы, применять методы компьютерного моделирования для решения задач профессиональной деятельности

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 2.2 – Анализирует и интерпретирует экспериментальные и теоретические данные, полученные в ходе научного исследования, обобщает полученные результаты, формулирует научно обоснованные выводы по результатам исследования

ИПК 1.1 – Собирает и анализирует научно-техническую информацию по теме исследования, обобщает научные данные в соответствии с задачами исследования;

ИПК 3.1 – Знает основы программирования, владеет навыками создания компьютерных моделей физических явлений и процессов;

ИПК 3.2 – Использует общее и специализированное программное обеспечение для теоретических расчетов и анализа экспериментальных данных.

2. Задачи освоения дисциплины

– Знакомство с понятийным и математическим аппаратом теории функционала электронной плотности

– Приобретение практических навыков применения метода функционала электронной плотности для расчета свойств кристаллических материалов

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль «Физика полупроводников».

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Восьмой семестр, зачет

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты освоения следующих дисциплин: кристаллография, физика полупроводников, физика твердого тела, кристаллохимия, квантовая механика.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых: практические занятия: 24 ч;

В том числе практическая подготовка: 24 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

- Тема 1. Оптимизация структуры кристалла.
- Тема 2. Моделирование дефектов кристаллической структуры.
- Тема 3. Расчет зонной структуры кристалла.
- Тема 4. Моделирование поверхности кристалла.
- Тема 5. Расчет поверхностной энергии кристалла.
- Тема 6. Моделирование поверхностных процессов.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля выполнения лабораторных работ, а также в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр. Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по курсу проводится в восьмом семестре в форме зачета с учетом результатов текущей аттестации. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>

11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=1559>
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
- в) План практических занятий по дисциплине.
- г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
 - Tsuneda T. Density functional theory in quantum chemistry. Berlin: Springer. – 2014. – 200 p. – URL: <https://link.springer.com/book/10.1007/978-4-431-54825-6>
- б) дополнительная литература:
 - Заводинский В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем. – М.: Физматлит. 2013. – 174 с.
- в) ресурсы сети Интернет:
 - QuantumEspresso <https://www.quantum-espresso.org/>
 - MaX School on Advanced Materials and Molecular Modelling with Quantum ESPRESSO <https://indico.ictp.it/event/9616/>

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
 - Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

- Adobe Acrobat Reader DC;
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных (*при наличии*):

- База данных химических соединений Королевского химического общества (Великобритания) - <http://www.chemspider.com/>
- Химическая база данных Национального института здоровья (США) - <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
- База данных «Термические константы веществ» <http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа в смешенном формате («Актру»), аудитории для индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, доступом в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Филимонов Сергей Николаевич, канд. физ-мат. наук, декан ФФ ТГУ;

Алексеев Александр Олегович, ассистент кафедры физики полупроводников ФФ ТГУ.