**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
**«Самарский государственный технический университет»**
(ФГБОУ ВО «СамГТУ»)

УТВЕРЖДАЮ:
Проректор по учебной работе
_____ / О.В. Юсупова
"_____" _____ 20___ г.

# РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

## Б1.В.15 «Основы математического моделирования материалов»

| | |
|---|---|
| **Код и направление подготовки (специальность)** | 04.03.02 Химия, физика и механика материалов |
| **Направленность (профиль)** | Функциональные, конструкционные материалы и наноматериалы |
| **Квалификация** | Бакалавр |
| **Форма обучения** | Очная |
| **Год начала подготовки** | 2022 |
| **Институт / факультет** | Химико-технологический факультет (ХТФ) |
| **Выпускающая кафедра** | кафедра "Общая и неорганическая химия" |
| **Кафедра-разработчик** | кафедра "Общая и неорганическая химия" |
| **Объем дисциплины, ч. / з.е.** | 108 / 3 |
| **Форма контроля (промежуточная аттестация)** | Зачет с оценкой |

Самара 2022

**Б1.В.15 «Основы математического моделирования материалов»**

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки (специальности) **04.03.02 Химия, физика и механика материалов**, утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ от № 651 от 13.07.2017 и соответствующего учебного плана.

Разработчик РПД:

| | |
|---|---|
| Профессор, доктор физико-математических наук, профессор | А.Ф Крутов |
| (должность, степень, ученое звание) | (ФИО) |

| | |
|---|---|
| Заведующий кафедрой | В.А. Блатов, доктор химических наук, профессор |
| | (ФИО, степень, ученое звание) |

СОГЛАСОВАНО:

| | |
|---|---|
| Председатель методического совета факультета / института (или учебно-методической комиссии) | О.В Лаврентьева, кандидат химических наук, доцент |
| | (ФИО, степень, ученое звание) |
| Руководитель образовательной программы | Е.М. Егорова, кандидат химических наук, доцент |
| | (ФИО, степень, ученое звание) |

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы ..... 4
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы ..... 5
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся ..... 6
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам), с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий ..... 7
4.1 Содержание лекционных занятий ..... 7
4.2 Содержание лабораторных занятий ..... 9
4.3 Содержание практических занятий ..... 11
4.4. Содержание самостоятельной работы ..... 11
5. Перечень учебной литературы и учебно-методического обеспечения по дисциплине (модулю) ..... 13
6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения ..... 13
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», профессиональных баз данных, информационно-справочных систем ..... 14
8. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю) ..... 14
9. Методические материалы ..... 14
10. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) ..... 16

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

| Наименование категории (группы) компетенций | Код и наименование компетенции | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Результаты обучения (знать, уметь, владеть, соотнесенные с индикаторами достижения компетенции) |
|---|---|---|---|
| Профессиональные компетенции | | | |
| Не предусмотрено | ПК-1 Способен использовать основные современные методологические, теоретические и экспериментальные подходы к проведению научных исследований фундаментального и прикладного характера в области химии, физики и механики функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов | ПК-1.1 Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений. | Знать методы критического анализа и оценки современных научных достижений в области моделирования материалов |
| | | ПК-1.2 Знать: современное состояние науки в области синтеза функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов. | Знать современное состояние науки в области математического моделирования функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов |
| | | ПК-1.3 Уметь: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. | Уметь анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач в области теоретического материаловедения. |
| | | ПК-1.5 Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научной и справочной литературе, пользоваться литературой, получать необходимую информацию из литературных источников, в том числе из электронных баз данных, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | Уметь выделять и систематизировать основные идеи математического моделирования материалов в научной литературе, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. |

| | | | |
|---|---|---|---|
| | | ПК-1.6 Уметь: разрабатывать концепцию проведения исследований на определение параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | Уметь разрабатывать концепцию проведения математических расчетов для определения параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. |
| | ПК-3 Способен оптимизировать и реализовывать основные технологии получения современных материалов | ПК-3.1 Знать: основные физические, химические и механические свойства различных веществ и материалов. | Знать способы вычисления основных физических, химических и механических свойств материалов. |
| | | ПК-3.3 Уметь: планировать основные этапы синтеза материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры синтеза, прогнозировать продукты синтеза. | Уметь планировать основные этапы процесса моделирования свойств материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры расчетов, прогнозировать продукты моделирования. |
| | | ПК-3.5 Уметь: осуществлять математическую обработку и анализ результатов экспериментов и применять информационные технологии. | Уметь осуществлять математическую обработку и анализ результатов численных экспериментов и применять информационные технологии. |

## 2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы: **часть, формируемая участниками образовательных отношений**

| **Код компетенции** | **Предшествующие дисциплины** | **Параллельно осваиваемые дисциплины** | **Последующие дисциплины** |
|---|---|---|---|

| | | | |
|---|---|---|---|
| ПК-1 | Биохимия и основы наук о жизни; Деловой иностранный язык; Классическая механика; Колебательная спектроскопия неорганических систем; Методы изображения и разбиения многокомпонентных систем; Механика сплошной среды; Практико-ориентированный проект; Производственная практика: научно-исследовательская работа; Теория строения вещества и основы кристаллохимии; Термический анализ и калориметрия; Термодинамика твердофазных реакций; Учебная практика: проектная практика; Физико-химический анализ - основа современного материаловедения; Физические свойства материалов; Численные методы в материаловедении; Электрохимия; Элементы строения вещества | История и методология химии; Моделирование физических свойств материалов; Основы моделирования фазовых систем; Практико-ориентированный проект; Физико-химические методы исследования веществ и материалов; Химия и физика полимеров; Химия функциональных материалов; Экспериментальные методы физико-химического анализа | Механика материалов; Подготовка к процедуре защиты и процедура защиты выпускной квалификационной работы; Производственная практика: преддипломная практика; Физико-химия и технология материалов; Функциональные, конструкционные материалы и наноматериалы |
| ПК-3 | Классическая механика; Практико-ориентированный проект; Производственная практика: научно-исследовательская работа; Физико-химический анализ - основа современного материаловедения; Физические свойства материалов; Численные методы в материаловедении | Основы моделирования фазовых систем; Практико-ориентированный проект; Расчет и прогнозирование свойств неорганических соединений; Синтез, структура и свойства наноматериалов; Физико-химические методы исследования веществ и материалов; Химия и физика полимеров; Химия функциональных материалов; Экспериментальные методы физико-химического анализа | Механика материалов; Подготовка к процедуре защиты и процедура защиты выпускной квалификационной работы; Производственная практика: преддипломная практика; Расчет и прогнозирование свойств неорганических соединений; Синтез, структура и свойства наноматериалов; Физико-химия и технология материалов; Функциональные, конструкционные материалы и наноматериалы |

## 3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

| Вид учебной работы | Всего часов / часов в электронной форме | 7 семестр часов / часов в электронной форме |
|---|---|---|
| **Аудиторная контактная работа (всего),** в том числе: | 48 | 48 |
| Лабораторные работы | 32 | 32 |
| Лекции | 16 | 16 |
| **Внеаудиторная контактная работа, КСР** | 6 | 6 |

| | | |
|---|---|---|
| **Самостоятельная работа (всего),** в том числе: | 50 | 50 |
| выполнение курсовых работ | 8 | 8 |
| подготовка к зачету | 2 | 2 |
| подготовка к лабораторным работам | 40 | 40 |
| **Итого: час** | 108 | 108 |
| **Итого: з.е.** | 3 | 3 |

## 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам), с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

| № раздела | Наименование раздела дисциплины | Виды учебной нагрузки и их трудоемкость, часы | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | | ЛЗ | ЛР | ПЗ | СРС | Всего часов |
| 1 | Системы многих частиц в квантовой механике | 2 | 4 | 0 | 6 | 12 |
| 2 | Теория функционала электронной плотности (ТФП) | 2 | 4 | 0 | 6 | 12 |
| 3 | Равновесные конфигурации в ТФП: теоретические основания, численные расчеты, эксперимент | 2 | 4 | 0 | 6 | 12 |
| 4 | Моделирование механических свойств материалов | 2 | 4 | 0 | 6 | 12 |
| 5 | Моделирование термических свойств материалов | 2 | 4 | 0 | 6 | 12 |
| 6 | Моделирование зонной структуры и свойств проводимости материалов | 2 | 4 | 0 | 6 | 12 |
| 7 | Моделирование оптических свойств материалов | 2 | 4 | 0 | 6 | 12 |
| 8 | Моделирование магнитных свойств материалов | 2 | 4 | 0 | 8 | 14 |
| | **КСР** | 0 | 0 | 0 | 0 | 6 |
| | **Итого** | 16 | 32 | 0 | 50 | 104 |

### 4.1 Содержание лекционных занятий

| № занятия | Наименование раздела | Тема лекции | Содержание лекции (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов) | Количество часов / часов в электронной форме |
|---|---|---|---|---|
| **7 семестр** | | | | |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 1 | Системы многих частиц в квантовой механике | Система многих частиц в квантовой механике | Вещество как совокупность атомных ядер и электронов. Кулоновское взаимодействие. Многочастичное уравнение Шредингера. Вариационный принцип. Бозоны и фермионы. Принцип Паули. Приближение среднего поля. Уравнение Хартри-Фока. Принципиальные трудности решения многочастичной квантовой задачи. | 2 |
| 2 | Теория функционала электронной плотности (ТФП) | Теория функционала электронной плотности (ТФП). | Энергия основного состояния многоэлектронной системы. Теоремы Хоенберга-Кона. Уравнение Кона-Шема. Обменные и корреляционный потенциалы. Самосогласованная процедура решения уравнения Кона-Шема. Границы применимости ТФП. | 2 |
| 3 | Равновесные конфигурации в ТФП: теоретические основания, численные расчеты, эксперимент | Равновесные конфигурации в ТФП: теоретические основания, численные расчеты, эксперимент | Адиабатическое приближение. Силы, действующие на ион. Расчет сил в классической электродинамике. Теорема Фейнмана-Хельманна. Равновесные конфигурации атомов. Псевдопотенциалы. Экспериментальная проверка расчетов в ТФП. | 2 |
| 4 | Моделирование механических свойств материалов | Моделирование механических свойств материалов. | Упругие деформации. Общий формализм описания упругих свойств твердого тела. Тензор деформаций. Тензор напряжений. Тензор упругих констант. Обозначения Войта. Расчет упругих констант в ТФП. | 2 |
| 5 | Моделирование термических свойств материалов | Моделирование термических свойств материалов | Колебания ионов кристаллической решетки. Фононы. Энергия фононов. Плотность состояний фононов. Ансамбль фононных состояний. Функции распределения. Статистическая сумма. PT- фазовые диаграммы состояния. | 2 |
| 6 | Моделирование зонной структуры и свойств проводимости материалов | Моделирование зонной структуры и свойств электрической проводимости | Волновые функции и уровни энергии Кона-Шема. Теорема Блоха в формализме Кона-Шема. Моделирование зонной структуры в ТФП. Металлы, полупроводники, диэлектрики с точки зрения зонной теории. | 2 |
| 7 | Моделирование оптических свойств материалов | Моделирование оптических свойств материалов | Динамика связанного электрона во внешнем переменном электрическом поле. Наведенный дипольный момент и электронная поляризуемость. Соотношения Клаузиуса-Моссотти. Диэлектрическая проницаемость твердого тела. Моделирование диэлектрической проницаемости в ТФП. | 2 |
| 8 | Моделирование магнитных свойств материалов | Моделирование магнитных свойств материалов | Спин электрона. Уравнение Дирака. Магнитный момент электрона. Спин в ТФП. Вычисление намагниченности в ТФП. | 2 |

| | |
|---|---|
| **Итого за семестр:** | **16** |
| **Итого:** | **16** |

## 4.2 Содержание лабораторных занятий

| **№ занятия** | **Наименование раздела** | **Тема лабораторного занятия** | **Содержание лабораторного занятия** (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов) | **Количество часов / часов в электронной форме** |
|---|---|---|---|---|
| **7 семестр** | | | | |
| 1 | Системы многих частиц в квантовой механике | Работа в командной строке unix. Запуск программ моделирования. Основные параметры расчёта. Оптимизация структур. | Основные операции командной строки unix. Система очередей. Виды ТФП-программ для моделирования свойств материалов. Псевдопотенциал, волновая функция. Основные параметры расчёта. Оптимизация структур. Уравнение состояния. Сходимость расчёта. | 2 |
| 2 | Системы многих частиц в квантовой механике | Работа в командной строке unix. Запуск программ моделирования. Основные параметры расчёта. Оптимизация структур. | Основные операции командной строки unix. Система очередей. Виды ТФП-программ для моделирования свойств материалов. Псевдопотенциал, волновая функция. Основные параметры расчёта. Оптимизация структур. Уравнение состояния. Сходимость расчёта. | 2 |
| 3 | Теория функционала электронной плотности (ТФП) | Моделирование механических свойств материалов. Моделирование диффузии в кристаллах | Уравнение состояния Берча – Мурнагана. Связь упругих свойств материалов со скоростью звука и температурой плавления. Диффузия в твёрдых телах. Коэффициент диффузии, энергия миграции. Энергия образования вакансии. Метод упругой эластичной ленты для моделирования диффузии. Молекулярная динамика для оценки коэффициента диффузии. | 2 |
| 4 | Теория функционала электронной плотности (ТФП) | Моделирование механических свойств материалов. Моделирование диффузии в кристаллах. | Уравнение состояния Берча – Мурнагана. Связь упругих свойств материалов со скоростью звука и температурой плавления. Диффузия в твёрдых телах. Коэффициент диффузии, энергия миграции. Энергия образования вакансии. Метод упругой эластичной ленты для моделирования диффузии. Молекулярная динамика для оценки коэффициента диффузии. | 2 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 5 | Равновесные конфигурации в ТФП: теоретические основания, численные расчеты, эксперимент | Современные подходы к моделированию разупорядоченных кристаллов | Дефекты в кристаллах. Виды дефектов. Легирование. Суперячейка. Определение наиболее выгодной конфигурации для разупорядоченного кристалла. | 2 |
| 6 | Равновесные конфигурации в ТФП: теоретические основания, численные расчеты, эксперимент | Современные подходы к моделированию разупорядоченных кристаллов. | Дефекты в кристаллах. Виды дефектов. Легирование. Суперячейка. Определение наиболее выгодной конфигурации для разупорядоченного кристалла. | 2 |
| 7 | Моделирование механических свойств материалов | Моделирование механические свойств твёрдых тел. | Упругие деформации. Тензор деформаций. Тензор напряжений. Тензор упругих констант. Обозначения Войта. Стабильность материалов. Анизотропия упругих свойств. Модули упругости, твёрдость, коэффициент Пуассона. | 2 |
| 8 | Моделирование механических свойств материалов | Моделирование механические свойств твёрдых тел. | Упругие деформации. Тензор деформаций. Тензор напряжений. Тензор упругих констант. Обозначения Войта. Стабильность материалов. Анизотропия упругих свойств. Модули упругости, твёрдость, коэффициент Пуассона. | 2 |
| 9 | Моделирование термических свойств материалов | Моделирование термических свойств материалов | Фазовая диаграмма. Колебания ионов кристаллической решетки. Фононы. Гармоническое и квазигармоническое приближение, фононный спектр. Стабильность материалов. Расчёт коэффициентов теплового расширения и теплоёмкости материалов. | 2 |
| 10 | Моделирование термических свойств материалов | Моделирование термических свойств материалов | Фазовая диаграмма. Колебания ионов кристаллической решетки. Фононы. Гармоническое и квазигармоническое приближение, фононный спектр. Стабильность материалов. Расчёт коэффициентов теплового расширения и теплоёмкости материалов. | 2 |
| 11 | Моделирование зонной структуры и свойств проводимости материалов | Моделирование зонной структуры и свойств электрической проводимости | Основные положения зонной теории твёрдых тел. Энергия Ферми, ширина запрещённой зоны, прямой и непрямой переход. Запрещённая зона и оптические свойства материала. Металлы, полупроводники, диэлектрики с точки зрения зонной теории. Моделирование зонной структуры кристаллов. | 2 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 12 | Моделирование зонной структуры и свойств проводимости материалов | Моделирование зонной структуры и свойств электрической проводимости | Основные положения зонной теории твёрдых тел. Энергия Ферми, ширина запрещённой зоны, прямой и непрямой переход. Запрещённая зона и оптические свойства материала. Металлы, полупроводники, диэлектрики с точки зрения зонной теории. Моделирование зонной структуры кристаллов. | 2 |
| 13 | Моделирование оптических свойств материалов | Моделирование оптических свойств материалов | Тензор диэлектрической проницаемости анизотропных сред. Комплексная диэлектрическая проницаемость. Частотная зависимость проницаемости. Диэлектрическая проницаемость и спектр поглощения. Показатели преломления и отражения, коэффициенты поглощения. Моделирование оптических свойств кристаллов. | 2 |
| 14 | Моделирование оптических свойств материалов | Моделирование оптических свойств материалов | Тензор диэлектрической проницаемости анизотропных сред. Комплексная диэлектрическая проницаемость. Частотная зависимость проницаемости. Диэлектрическая проницаемость и спектр поглощения. Показатели преломления и отражения, коэффициенты поглощения. Моделирование оптических свойств кристаллов. | 2 |
| 15 | Моделирование магнитных свойств материалов | Моделирование магнитных свойств материалов | Магнитный момент. Типы магнитного упорядочения. Локализация электронов. Учёт магнитного упорядочения при моделировании материалов. | 2 |
| 16 | Моделирование магнитных свойств материалов | Моделирование магнитных свойств материалов | Магнитный момент. Типы магнитного упорядочения. Локализация электронов. Учёт магнитного упорядочения при моделировании материалов. | 2 |
| | | | **Итого за семестр:** | **32** |
| | | | **Итого:** | **32** |

## 4.3 Содержание практических занятий

Учебные занятия не реализуются.

## 4.4. Содержание самостоятельной работы

| **Наименование раздела** | **Вид самостоятельной работы** | **Содержание самостоятельной работы** (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов) | **Количество часов** |
|---|---|---|---|
| **7 семестр** | | | |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Системы многих частиц в квантовой механике | подготовка к лабораторной работе, выполнение соответствующих заданий, выполнение курсовой работы. | Компьютерная реализация вычислительных алгоритмов квантовой механики. Выполнение курсовой работы. | 6 |
| Теория функционала электронной плотности (ТФП) | подготовка к лабораторной работе, выполнение соответствующих заданий, выполнение курсовой работы. | Компьютерная реализация вычислительных алгоритмов теории функционала плотности. Выполнение курсовой работы | 6 |
| Равновесные конфигурации в ТФП: теоретические основания, численные расчеты, эксперимент | подготовка к лабораторной работе, выполнение соответствующих заданий, выполнение курсовой работы. | Компьютерная реализация вычислительных алгоритмов для нахождения равновесных конфигураций. Выполнение курсовой работы. | 6 |
| Моделирование механических свойств материалов | подготовка к лабораторной работе, выполнение соответствующих заданий, выполнение курсовой работы. | Компьютерная реализация алгоритмов расчета механических свойств материала. Выполнение курсовой работы. | 6 |
| Моделирование термических свойств материалов | подготовка к лабораторной работе, выполнение соответствующих заданий, выполнение курсовой работы. | Компьютерная реализация алгоритмов расчета механических свойств материала. Выполнение курсовой работы. | 6 |
| Моделирование зонной структуры и свойств проводимости материалов | подготовка к лабораторной работе, выполнение соответствующих заданий, выполнение курсовой работы. | Компьютерная реализация алгоритмов расчета механических свойств материала. Выполнение курсовой работы. | 6 |
| Моделирование оптических свойств материалов | подготовка к лабораторной работе, выполнение соответствующих заданий, выполнение курсовой работы. | Компьютерная реализация алгоритмов расчета механических свойств материала. Выполнение курсовой работы. | 6 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Моделирование магнитных свойств материалов | подготовка к лабораторной работе, выполнение соответствующих заданий, выполнение курсовой работы. | Компьютерная реализация алгоритмов расчета механических свойств материала. Выполнение курсовой работы. | 8 |
| | | **Итого за семестр:** | **50** |
| | | **Итого:** | **50** |

## 5. Перечень учебной литературы и учебно-методического обеспечения по дисциплине (модулю)

| № п/п | Библиографическое описание | Ресурс НТБ СамГТУ (ЭБС СамГТУ, IPRbooks и т.д.) |
|---|---|---|
| 1 | Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела : Пер.с англ. / Под общ.ред.А.А.Гусева.- М., Наука, 1978.- 791 с. | Электронный ресурс |
| Основная литература | | |
| 2 | Абрикосов, А.А. Методы квантовой теории поля в статистической физике / А.А.Абрикосов,Л.П.Горьков,И.Е.Дзялошинский .- [3-е изд.].- М., Добросвет, 2006М., КДУ.- 512 с. | Электронный ресурс |
| 3 | Квантовая физика и нанотехнологии; Техносфера, 2013.- Режим доступа: https://elib.samgtu.ru/getinfo?uid=els_samgtu\|\|iprbooks\|\|16975 | Электронный ресурс |
| Дополнительная литература | | |
| 4 | Матухин, В.Л. Физика твердого тела : учеб. пособие / В. Л. Матухин, В. Л. Ермаков.- М., Лань, 2010.- 218 с. | Электронный ресурс |
| 5 | Павлов, П.В. Физика твердого тела : Учеб. / П.В.Павлов,А.Ф.Хохлов .- 3-е изд.,стер..- М., Высш.шк., 2000.- 494 с. | Электронный ресурс |
| 6 | Физика твердого тела. Часть 2. Динамика кристаллической решетки. Тепловые свойства решетки; Прометей, 2011.- Режим доступа: https://elib.samgtu.ru/getinfo?uid=els_samgtu\|\|iprbooks\|\|9611 | Электронный ресурс |

Доступ обучающихся к ЭР НТБ СамГТУ (elib.samgtu.ru) осуществляется посредством электронной информационной образовательной среды университета и сайта НТБ СамГТУ по логину и паролю.

## 6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения

При проведении лекционных занятий используется мультимедийное оборудование.

Организовано взаимодействие обучающегося и преподавателя с использованием электронной ин-формационной образовательной среды университета.

| № п/п | Наименование | Производитель | Способ распространения |
|---|---|---|---|

| | | | |
|---|---|---|---|
| 1 | Операционная система Microsoft Windows (Сублицензионный договор №1010/17 от 01.06.2017 г.) | Microsoft (Зарубежный) | Лицензионное |
| 2 | Пакет офисных программ Microsoft Office в составе: Word, Excel, PowerPoint, OneNote, Outlook, Publisher, Access (Microsoft Open License) | Microsoft (Зарубежный) | Лицензионное |
| 3 | Пакет квантово-механических расчетов VASP | VASP Software GmbH (Зарубежный) | Лицензионное |

## 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», профессиональных баз данных, информационно-справочных систем

| № п/п | Наименование | Краткое описание | Режим доступа |
|---|---|---|---|
| 1 | Электронно-библиотечная система IPRbooks | http://www.iprbookshop.ru/ | Российские базы данных ограниченного доступа |
| 2 | eLIBRARY.ru | http://www.eLIBRARY.ru/ | Российские базы данных ограниченного доступа |
| 3 | ЭБС "Лань" | http://e.lanbook.com/ | Российские базы данных ограниченного доступа |
| 4 | Электронная библиотека изданий СамГТУ | http://irbis.samgtu.local/cgi-bin/irbis64r_01/cgiirbis_64.exe | Российские базы данных ограниченного доступа |

## 8. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

**Лекционные занятия**

Аудитории для лекционных занятий укомплектованы мебелью и техническими средствами обучения, служащими для наглядного представления учебной информации большой аудитории слушателей (набор демонстрационного оборудования - проектор, экран, компьютер/ноутбок - учебно-методические и учебно-наглядные пособия, тематические иллюстрации.

**Практические занятия** null

**Лабораторные занятия**

Для лабораторных занятий используется аудитория №300, оснащенная компьютерами.

**Самостоятельная работа**

Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с выходом в Интернет и доступом к электронной информационно-образовательной среде СамГТУ: читальный зал НТБ СамГТУ (ауд. 200, корпус №8; ауд. 125, корпус №1; ауд. 41, 31, 34, 35, Главный корпус библиотеки; ауд. 83а, 414, 416, 0203, корпус №12; ауд 401, корпус №10)

## 9. Методические материалы

### Методические рекомендации при работе на лекции

До лекции студент должен просмотреть учебно-методическую и научную литературу по теме

лекции с тем, чтобы иметь представление о проблемах, которые будут разбираться в лекции.

Перед началом лекции обучающимся сообщается тема лекции, план, вопросы, подлежащие рассмотрению, доводятся основные литературные источники. Весь учебный материал, сообщаемый преподавателем, должен не просто прослушиваться. Он должен быть активно воспринят, т.е. услышан, осмыслен, понят, зафиксирован на бумаге и закреплен в памяти. Приступая к слушанию нового учебного материала, полезно мысленно установить его связь с ранее изученным. Следя за техникой чтения лекции (акцент на существенном, повышение тона, изменение ритма, пауза и т.п.), необходимо вслед за преподавателем уметь выделять основные категории, законы и определять их содержание, проблемы, предполагать их возможные решения, доказательства и выводы. Осуществляя такую работу, можно значительно облегчить себе понимание учебного материала, его конспектирование и дальнейшее изучение.

Конспектирование лекции позволяет обработать, систематизировать и лучше сохранить полученную информацию с тем, чтобы в будущем можно было восстановить в памяти основные, содержательные моменты. Типичная ошибка, совершаемая обучающимся, дословное конспектирование речи преподавателя. Как правило, при записи «слово в слово» не остается времени на обдумывание, анализ и синтез информации. Отбирая нужную информацию, главные мысли, проблемы, решения и выводы, необходимо сокращать текст, строить его таким образом, чтобы потом можно было легко в нем разобраться. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых можно будет делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. С окончанием лекции работа над конспектом не может считаться завершенной. Нужно еще восстановить отдельные места, проверить, все ли понятно, уточнить что-то на консультации и т.п. с тем, чтобы конспект мог быть использован в процессе подготовки к практическим занятиям, зачету, экзамену. Конспект лекции – незаменимый учебный документ, необходимый для самостоятельной работы.

## Методические рекомендации при работе на лабораторном занятии

Проведение лабораторной работы делится на две условные части: теоретическую и практическую.

Необходимыми структурными элементами занятия являются проведение лабораторной работы, проверка усвоенного материала, включающая обсуждение теоретических основ выполняемой работы.

Перед лабораторной работой, как правило, проводится технико-теоретический инструктаж по использованию необходимого оборудования. Преподаватель корректирует деятельность обучающегося в процессе выполнения работы (при необходимости). После завершения лабораторной работы подводятся итоги, обсуждаются результаты деятельности.

Возможны следующие формы организации лабораторных работ: фронтальная, групповая и индивидуальная. При фронтальной форме выполняется одна и та же работа (при этом возможны различные варианты заданий). При групповой форме работа выполняется группой (командой). При индивидуальной форме обучающимися выполняются индивидуальные работы.

По каждой лабораторной работе имеются методические указания по их выполнению, включающие необходимый теоретический и практический материал, содержащие элементы и последовательную инструкцию по проведению выбранной работы, индивидуальные варианты заданий, требования и форму отчётности по данной работе.

## Методические рекомендации по выполнению самостоятельной работы

Организация самостоятельной работы обучающихся ориентируется на активные методы овладения знаниями, развитие творческих способностей, переход от поточного к индивидуализированному обучению с учетом потребностей и возможностей обучающегося.

Самостоятельная работа с учебниками, учебными пособиями, научной, справочной литературой, материалами периодических изданий и Интернета является наиболее эффективным методом получения дополнительных знаний, позволяет значительно активизировать процесс овладения информацией, способствует более глубокому усвоению изучаемого материала. Все новые понятия по изучаемой теме необходимо выучить наизусть и внести в глоссарий, который целесообразно вести с самого начала изучения курса.

Самостоятельная работа реализуется:

- непосредственно в процессе аудиторных занятий;
- на лекциях, практических занятиях;
- в контакте с преподавателем вне рамок расписания;
- на консультациях по учебным вопросам, в ходе творческих контактов, при ликвидации задолженностей, при выполнении индивидуальных заданий и т.д.;
- в библиотеке, дома, на кафедре при выполнении обучающимся учебных и практических задач.

Эффективным средством осуществления обучающимся самостоятельной работы является электронная информационно-образовательная среда университета, которая обеспечивает доступ к учебным планам, рабочим программам дисциплин (модулей), практик, к изданиям электронных библиотечных систем.

## 10. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств представлен в приложении № 1.

Приложение 1 к рабочей программе дисциплины
Б1.В.15 «Основы математического моделирования материалов»

**Фонд оценочных средств**
**по дисциплине**
**Б1.В.15 «Основы математического моделирования материалов»**

| | |
|---|---|
| **Код и направление подготовки (специальность)** | 04.03.02 Химия, физика и механика материалов |
| **Направленность (профиль)** | Функциональные, конструкционные материалы и наноматериалы |
| **Квалификация** | Бакалавр |
| **Форма обучения** | Очная |
| **Год начала подготовки** | 2022 |
| **Институт / факультет** | Химико-технологический факультет (ХТФ) |
| **Выпускающая кафедра** | кафедра "Общая и неорганическая химия" |
| **Кафедра-разработчик** | кафедра "Общая и неорганическая химия" |
| **Объем дисциплины, ч. / з.е.** | 108 / 3 |
| **Форма контроля (промежуточная аттестация)** | Зачет с оценкой |

**Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

| Наименование категории (группы) компетенций | Код и наименование компетенции | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Результаты обучения (знать, уметь, владеть, соотнесенные с индикаторами достижения компетенции) |
|---|---|---|---|
| Профессиональные компетенции | | | |
| Не предусмотрено | ПК-1 Способен использовать основные современные методологические, теоретические и экспериментальные подходы к проведению научных исследований фундаментального и прикладного характера в области химии, физики и механики функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов | ПК-1.1 Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений. | Знать методы критического анализа и оценки современных научных достижений в области моделирования материалов |
| | | ПК-1.2 Знать: современное состояние науки в области синтеза функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов. | Знать современное состояние науки в области математического моделирования функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов |
| | | ПК-1.3 Уметь: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. | Уметь анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач в области теоретического материаловедения. |
| | | ПК-1.5 Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научной и справочной литературе, пользоваться литературой, получать необходимую информацию из литературных источников, в том числе из электронных баз данных, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | Уметь выделять и систематизировать основные идеи математического моделирования материалов в научной литературе, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. |

| | | | |
|---|---|---|---|
| | | ПК-1.6 Уметь: разрабатывать концепцию проведения исследований на определение параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | Уметь разрабатывать концепцию проведения математических расчетов для определения параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. |
| | ПК-3 Способен оптимизировать и реализовывать основные технологии получения современных материалов | ПК-3.1 Знать: основные физические, химические и механические свойства различных веществ и материалов. | Знать способы вычисления основных физических, химических и механических свойств материалов. |
| | | ПК-3.3 Уметь: планировать основные этапы синтеза материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры синтеза, прогнозировать продукты синтеза. | Уметь планировать основные этапы процесса моделирования свойств материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры расчетов, прогнозировать продукты моделирования. |
| | | ПК-3.5 Уметь: осуществлять математическую обработку и анализ результатов экспериментов и применять информационные технологии. | Уметь осуществлять математическую обработку и анализ результатов численных экспериментов и применять информационные технологии. |

## Матрица соответствия оценочных средств запланированным результатам обучения

| Код индикатора достижения компетенции | Результаты обучения | Оценочные средства | Текущий контроль успеваемости | Промежуточная аттестация |
|---|---|---|---|---|
| **Системы многих частиц в квантовой механике** | | | | |
| ПК-1.1 Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений. | **Знать** методы критического анализа и оценки современных научных достижений в области моделирования материалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.2 Знать: современное состояние науки в области синтеза функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов. | **Знать** современное состояние науки в области математического моделирования функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.3 Уметь: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. | **Уметь** анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач в области теоретического материаловедения. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ПК-1.5 Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научной и справочной литературе, пользоваться литературой, получать необходимую информацию из литературных источников, в том числе из электронных баз данных, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | **Уметь** выделять и систематизировать основные идеи математического моделирования материалов в научной литературе, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.6 Уметь: разрабатывать концепцию проведения исследований на определение параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | **Уметь** разрабатывать концепцию проведения математических расчетов для определения параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.1 Знать: основные физические, химические и механические свойства различных веществ и материалов. | **Знать** способы вычисления основных физических, химических и механических свойств материалов. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.3 Уметь: планировать основные этапы синтеза материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры синтеза, прогнозировать продукты синтеза. | **Уметь** планировать основные этапы процесса моделирования свойств материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры расчетов, прогнозировать продукты моделирования. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.5 Уметь: осуществлять математическую обработку и анализ результатов экспериментов и применять информационные технологии. | **Уметь** осуществлять математическую обработку и анализ результатов численных экспериментов и применять информационные технологии. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| **Теория функционала электронной плотности (ТФП)** | | | | |
| ПК-1.1 Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений. | **Знать** методы критического анализа и оценки современных научных достижений в области моделирования материалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ПК-1.2 Знать: современное состояние науки в области синтеза функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов. | **Знать** современное состояние науки в области математического моделирования функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.3 Уметь: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. | **Уметь** анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач в области теоретического материаловедения. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.5 Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научной и справочной литературе, пользоваться литературой, получать необходимую информацию из литературных источников, в том числе из электронных баз данных, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | **Уметь** выделять и систематизировать основные идеи математического моделирования материалов в научной литературе, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.6 Уметь: разрабатывать концепцию проведения исследований на определение параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | **Уметь** разрабатывать концепцию проведения математических расчетов для определения параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.1 Знать: основные физические, химические и механические свойства различных веществ и материалов. | **Знать** способы вычисления основных физических, химических и механических свойств материалов. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.3 Уметь: планировать основные этапы синтеза материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры синтеза, прогнозировать продукты синтеза. | **Уметь** планировать основные этапы процесса моделирования свойств материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры расчетов, прогнозировать продукты моделирования. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ПК-3.5 Уметь: осуществлять математическую обработку и анализ результатов экспериментов и применять информационные технологии. | **Уметь** осуществлять математическую обработку и анализ результатов численных экспериментов и применять информационные технологии. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| **Равновесные конфигурации в ТФП: теоретические основания, численные расчеты, эксперимент** | | | | |
| ПК-1.1 Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений. | **Знать** методы критического анализа и оценки современных научных достижений в области моделирования материалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.2 Знать: современное состояние науки в области синтеза функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов. | **Знать** современное состояние науки в области математического моделирования функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.3 Уметь: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. | **Уметь** анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач в области теоретического материаловедения. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.5 Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научной и справочной литературе, пользоваться литературой, получать необходимую информацию из литературных источников, в том числе из электронных баз данных, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | **Уметь** выделять и систематизировать основные идеи математического моделирования материалов в научной литературе, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.6 Уметь: разрабатывать концепцию проведения исследований на определение параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | **Уметь** разрабатывать концепцию проведения математических расчетов для определения параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ПК-3.1 Знать: основные физические, химические и механические свойства различных веществ и материалов. | **Знать** способы вычисления основных физических, химических и механических свойств материалов. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.3 Уметь: планировать основные этапы синтеза материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры синтеза, прогнозировать продукты синтеза. | **Уметь** планировать основные этапы процесса моделирования свойств материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры расчетов, прогнозировать продукты моделирования. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.5 Уметь: осуществлять математическую обработку и анализ результатов экспериментов и применять информационные технологии. | **Уметь** осуществлять математическую обработку и анализ результатов численных экспериментов и применять информационные технологии. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| **Моделирование механических свойств материалов** | | | | |
| ПК-1.1 Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений. | **Знать** методы критического анализа и оценки современных научных достижений в области моделирования материалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.2 Знать: современное состояние науки в области синтеза функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов. | **Знать** современное состояние науки в области математического моделирования функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.3 Уметь: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. | **Уметь** анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач в области теоретического материаловедения. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ПК-1.5 Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научной и справочной литературе, пользоваться литературой, получать необходимую информацию из литературных источников, в том числе из электронных баз данных, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | **Уметь** выделять и систематизировать основные идеи математического моделирования материалов в научной литературе, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.6 Уметь: разрабатывать концепцию проведения исследований на определение параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | **Уметь** разрабатывать концепцию проведения математических расчетов для определения параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.1 Знать: основные физические, химические и механические свойства различных веществ и материалов. | **Знать** способы вычисления основных физических, химических и механических свойств материалов. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.3 Уметь: планировать основные этапы синтеза материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры синтеза, прогнозировать продукты синтеза. | **Уметь** планировать основные этапы процесса моделирования свойств материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры расчетов, прогнозировать продукты моделирования. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.5 Уметь: осуществлять математическую обработку и анализ результатов экспериментов и применять информационные технологии. | **Уметь** осуществлять математическую обработку и анализ результатов численных экспериментов и применять информационные технологии. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| **Моделирование термических свойств материалов** | | | | |
| ПК-1.1 Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений. | **Знать** методы критического анализа и оценки современных научных достижений в области моделирования материалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ПК-1.2 Знать: современное состояние науки в области синтеза функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов. | **Знать** современное состояние науки в области математического моделирования функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.3 Уметь: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. | **Уметь** анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач в области теоретического материаловедения. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.5 Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научной и справочной литературе, пользоваться литературой, получать необходимую информацию из литературных источников, в том числе из электронных баз данных, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | **Уметь** выделять и систематизировать основные идеи математического моделирования материалов в научной литературе, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.6 Уметь: разрабатывать концепцию проведения исследований на определение параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | **Уметь** разрабатывать концепцию проведения математических расчетов для определения параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.1 Знать: основные физические, химические и механические свойства различных веществ и материалов. | **Знать** способы вычисления основных физических, химических и механических свойств материалов. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.3 Уметь: планировать основные этапы синтеза материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры синтеза, прогнозировать продукты синтеза. | **Уметь** планировать основные этапы процесса моделирования свойств материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры расчетов, прогнозировать продукты моделирования. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ПК-3.5 Уметь: осуществлять математическую обработку и анализ результатов экспериментов и применять информационные технологии. | **Уметь** осуществлять математическую обработку и анализ результатов численных экспериментов и применять информационные технологии. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| **Моделирование зонной структуры и свойств проводимости материалов** | | | | |
| ПК-1.1 Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений. | **Знать** методы критического анализа и оценки современных научных достижений в области моделирования материалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.2 Знать: современное состояние науки в области синтеза функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов. | **Знать** современное состояние науки в области математического моделирования функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.3 Уметь: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. | **Уметь** анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач в области теоретического материаловедения. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.5 Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научной и справочной литературе, пользоваться литературой, получать необходимую информацию из литературных источников, в том числе из электронных баз данных, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | **Уметь** выделять и систематизировать основные идеи математического моделирования материалов в научной литературе, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.6 Уметь: разрабатывать концепцию проведения исследований на определение параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | **Уметь** разрабатывать концепцию проведения математических расчетов для определения параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ПК-3.1 Знать: основные физические, химические и механические свойства различных веществ и материалов. | **Знать** способы вычисления основных физических, химических и механических свойств материалов. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.3 Уметь: планировать основные этапы синтеза материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры синтеза, прогнозировать продукты синтеза. | **Уметь** планировать основные этапы процесса моделирования свойств материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры расчетов, прогнозировать продукты моделирования. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.5 Уметь: осуществлять математическую обработку и анализ результатов экспериментов и применять информационные технологии. | **Уметь** осуществлять математическую обработку и анализ результатов численных экспериментов и применять информационные технологии. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| **Моделирование оптических свойств материалов** | | | | |
| ПК-1.1 Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений. | **Знать** методы критического анализа и оценки современных научных достижений в области моделирования материалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.2 Знать: современное состояние науки в области синтеза функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов. | **Знать** современное состояние науки в области математического моделирования функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.3 Уметь: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. | **Уметь** анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач в области теоретического материаловедения. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ПК-1.5 Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научной и справочной литературе, пользоваться литературой, получать необходимую информацию из литературных источников, в том числе из электронных баз данных, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | **Уметь** выделять и систематизировать основные идеи математического моделирования материалов в научной литературе, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.6 Уметь: разрабатывать концепцию проведения исследований на определение параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | **Уметь** разрабатывать концепцию проведения математических расчетов для определения параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.1 Знать: основные физические, химические и механические свойства различных веществ и материалов. | **Знать** способы вычисления основных физических, химических и механических свойств материалов. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.3 Уметь: планировать основные этапы синтеза материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры синтеза, прогнозировать продукты синтеза. | **Уметь** планировать основные этапы процесса моделирования свойств материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры расчетов, прогнозировать продукты моделирования. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.5 Уметь: осуществлять математическую обработку и анализ результатов экспериментов и применять информационные технологии. | **Уметь** осуществлять математическую обработку и анализ результатов численных экспериментов и применять информационные технологии. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| **Моделирование магнитных свойств материалов** | | | | |
| ПК-1.1 Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений. | **Знать** методы критического анализа и оценки современных научных достижений в области моделирования материалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ПК-1.2 Знать: современное состояние науки в области синтеза функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов. | **Знать** современное состояние науки в области математического моделирования функциональных, конструкционных материалов и наноматериалов | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.3 Уметь: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. | **Уметь** анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач в области теоретического материаловедения. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.5 Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научной и справочной литературе, пользоваться литературой, получать необходимую информацию из литературных источников, в том числе из электронных баз данных, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | **Уметь** выделять и систематизировать основные идеи математического моделирования материалов в научной литературе, составлять конспекты и планы текстов, находить необходимую информацию. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-1.6 Уметь: разрабатывать концепцию проведения исследований на определение параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | **Уметь** разрабатывать концепцию проведения математических расчетов для определения параметров соответствия предъявляемых требований к материалам. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.1 Знать: основные физические, химические и механические свойства различных веществ и материалов. | **Знать** способы вычисления основных физических, химических и механических свойств материалов. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |
| ПК-3.3 Уметь: планировать основные этапы синтеза материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры синтеза, прогнозировать продукты синтеза. | **Уметь** планировать основные этапы процесса моделирования свойств материалов с комплексом заданных свойств, подбирать параметры расчетов, прогнозировать продукты моделирования. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ПК-3.5 Уметь: осуществлять математическую обработку и анализ результатов экспериментов и применять информационные технологии. | **Уметь** осуществлять математическую обработку и анализ результатов численных экспериментов и применять информационные технологии. | Отчет по лабораторным работам, защита курсовой работы, подготовка к зачету | Да | Да |

**Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие процесс формирования компетенций в ходе освоения образовательной программы**

## Отчеты по лабораторным работам

Структура отчета приведена в методических указаниях к лабораторным работам. Теоретические вопросы к лабораторным работам совпадают с вопросами к зачету, а также приведены в содержании лекционных и лабораторных занятий (раздел 4).

## Примерные темы курсовых работ

1. Описание систем многих частиц в квантовой механике.
2. Математический аппарат теории функционала электронной плотности.
3. Описание механических свойств материалов в теории функционала плотности.
4. Описание термических свойств материалов в теории функционала плотности.
5. Зонная структура вещества и типы электрической проводимости.
6. Описание оптических свойств материалов, в том числе нелинейных.
7. Описание магнитных свойств материалов, в том числе квантовых.

## Вопросы для подготовки к зачету (1 семестр)

1.Вещество как совокупность атомных ядер и электронов.
2.Кулоновское взаимодействие.
3.Многочастичное уравнение Шредингера.
4.Вариационный принцип.
5.Бозоны и фермионы. Принцип Паули.
6.Приближение среднего поля.
7.Уравнение Хартри-Фока.
8.Принципиальные трудности решения многочастичной квантовой задачи.
9.Энергия основного состояния многоэлектронной системы.
10.Теоремы Хоенберга-Кона.
11.Уравнение Кона-Шема.
12.Обменные и корреляционный потенциалы.
13.Самогласованная процедура решения уравнения Кона-Шема.
14.Границы применимости ТФП.
15.Адиабатическое приближение.
16.Силы, действующие на ион. Расчет сил в классической электродинамике.
17.Теорема Фейнмана-Хельманна.
18.Равновесные конфигурации атомов.
19.Псевдопотенциалы.
20.Экспериментальная проверка расчетов в ТФП.
21.Упругие деформации. Общий формализм описания упругих свойств твердого тела.
22.Тензор деформаций. Тензор напряжений.
23.Тензор упругих констант. Обозначения Войта.
24.Расчет упругих констант в ТФП.
25.Колебания ионов кристаллической решетки. Фононы.
26.Энергия фононов. Плотность состояний фононов.
27.Ансамбль фононных состояний. Функции распределения. Статистическая сумма.
28.PT- фазовые диаграммы состояния.

29.Волновые функции и уровни энергии Кона-Шема.
30.Теорема Блоха в формализме Кона-Шема.
31.Моделирование зонной структуры в ТФП.
32.Металлы, полупроводники, диэлектрики с точки зрения зонной теории.
33.Динамика связанного электрона во внешнем переменном электрическом поле.
34.Наведенный дипольный момент и электронная поляризуемость.
35.Соотношения Клаузиуса-Моссотти. Диэлектрическая проницаемость твердого тела.
36. Моделирование диэлектрической проницаемости в ТФП.
37.Спин электрона. Уравнение Дирака.
38.Магнитный момент электрона.
39.Спин в ТФП.

**Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Максимальное количество баллов за семестр – 56. При проведении зачета учитываются результаты освоения дисциплины за семестр. Оценка «удовлетворительно» может быть выставлена студенту, если он набрал минимальное количество баллов (10) по каждой контрольной точке.

***Общее количество баллов за 7 семестр, максимум***

*Таблица 1*

| Вид работы (контрольные точки) | | Максимальное количество баллов | Вес, % |
|---|---|---|---|
| 1. | Отчет по лабораторной работе, вопросы к зачету, защита курсовой работы | 14 баллов | 25 |
| 2. | Отчет по лабораторной работе, вопросы к зачету, защита курсовой работы | 14 баллов | 25 |
| 3. | Отчет по лабораторной работе, вопросы к зачету, защита курсовой работы | 14 баллов | 25 |
| 4. | Отчет по лабораторной работе, вопросы к зачету, защита курсовой работы | 14 баллов | 25 |
| **ИТОГО** | | **56** | **100** |

***Критерии оценивания отчета по лабораторной работе***

Во время выполненная лабораторная работа с оформленным по требованиям отчетом оценивается в 1 балл. В одну контрольную точку входит две лабораторные работы. Максимальное количество баллов за одну КТ по лабораторным работам – 2 балла.

***Критерии оценивания курсовой работы***

Выполненная в течение семестра курсовая работа оценивается в 2 балл. В одну контрольную точку может входить одна курсовая работа. Максимальное количество баллов за одну КТ по лабораторным работам – 2 балла.

***Критерии оценивания подготовки вопросов к зачету***

Каждый правильный ответ оценивается в 1 балл. В одну контрольную точку входит десять вопросов. Максимальное количество баллов за одну КТ по вопросам к зачету – 10 баллов, минимальное 6 баллов.

***Перевод баллов за 1 КТ в пятибальную систему***

| Традиционная оценка | Баллы за 1 контрольную точку |
|---|---|
| 5 | 12-14 |
| 4 | 11-12 |
| 3 | 8-9 |
| 2 | 0-7 |

***Критерии и шкала оценивания результатов изучения дисциплины на промежуточной аттестации***

Шкала оценивания

«Отлично» – выставляется, если сформированность заявленных индикаторов компетенций 90% более (в соответствии с картами компетенций ОП): студент показал прочные знания основных положений фактического материала, умение самостоятельно решать конкретные практические задачи повышенной сложности, свободно использовать справочную литературу, делать обоснованные выводы из результатов анализа конкретных ситуаций;

«Хорошо» – выставляется, если сформированность заявленных индикаторов компетенций на 80% и более (в соответствии с картами компетенций ОП): обучающийся показал прочные знания основных положений фактического материала, умение самостоятельно решать конкретные практические задачи, предусмотренные рабочей программой, ориентироваться в рекомендованной справочной литературе, умеет правильно оценить полученные результаты анализа конкретных ситуаций;

«Удовлетворительно» – выставляется, если сформированность заявленных индикаторов компетенций 60% и более (в соответствии с картами компетенций ОП): обучающийся показал знание основных положений фактического материала, умение получить с помощью преподавателя правильное решение конкретной практической задачи из числа предусмотренных рабочей программой, знакомство с рекомендованной справочной литературой;

«Неудовлетворительно» – выставляется, если сформированность заявленных индикаторов компетенций менее чем 59% (в соответствии с картами компетенций ОП): при ответе обучающегося выявились существенные пробелы в знаниях основных положений фактического материала, неумение с помощью преподавателя получить правильное решение конкретной практической задачи из числа предусмотренных рабочей программой учебной дисциплины.