



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

30.01.2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

***КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР И ИХ
СВОЙСТВ***

Направление подготовки (специальность)
03.04.02 Физика

Направленность (профиль/специализация) программы
моделирование физических процессов и структур, преподавание физики

Уровень высшего образования - магистратура

Форма обучения
очная

Институт/ факультет	Институт естествознания и стандартизации
Кафедра	Физики
Курс	1
Семестр	2

Магнитогорск
2023 год

Рабочая программа составлена на основе ФГОС ВО - магистратура по направлению подготовки 03.04.02 Физика (приказ Минобрнауки России от 07.08.2020 г. № 914)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Физики
16.01.2023, протокол № 4

Зав. кафедрой _____ В.В.Мавринский

Рабочая программа одобрена методической комиссией ИЕиС
30.01.2023 г. протокол № 5

Председатель _____ И.Ю. Мезин

Рабочая программа составлена:

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

Рецензент:

доцент кафедры ПМий, канд. физ.-мат. наук _____ О.А.Торшина

Лист актуализации рабочей программы

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

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2024 - 2025 учебном году на заседании кафедры Физики

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

1 Цели освоения дисциплины (модуля)

Целями освоения дисциплины «Компьютерное моделирование наноструктур и их свойств», в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта ВО по направлению подготовки 03.04.02 Физика (уровень ВО магистратура), утвержденного 07.08.2020 г. (приказ № 914), являются:

1) обеспечение базовой подготовки, включающей в себя изучение и усвоение основ теории наноструктур, а также знакомство с численными методами при исследовании поверхностных и объемных свойств наноструктурных объектов;

2) формирование теоретической базы знаний, достаточной для анализа и решения современных научных и технических проблем, связанных с изучением свойств наноструктур.

2 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина Компьютерное моделирование наноструктур и их свойств входит в часть учебного плана формируемую участниками образовательных отношений образовательной программы.

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

Компьютерные технологии в науке и производстве

Теория твердого тела

Численное моделирование физических процессов переноса в твердых телах

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

Учебная - научно-исследовательская работа

Производственная - преддипломная практика

Производственная - практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности

Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы

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

В результате освоения дисциплины (модуля) «Компьютерное моделирование наноструктур и их свойств» обучающийся должен обладать следующими компетенциями:

Код индикатора	Индикатор достижения компетенции
ПК-1	Способен планировать и проводить экспериментальные исследования
ПК-1.1	Осуществляет проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований
ПК-1.2	Осуществляет выполнение экспериментов и оформление результатов исследований и разработок

4. Структура, объём и содержание дисциплины (модуля)

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

- контактная работа – 59,05 академических часов;
- аудиторная – 57 академических часов;
- внеаудиторная – 2,05 академических часов;
- самостоятельная работа – 48,95 академических часов;
- в форме практической подготовки – 0 академических часов;

Форма аттестации - курсовая работа, зачет с оценкой

Раздел/ тема дисциплины	Семестр	Аудиторная контактная работа (в академических 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	2	6	8/4И		12	Самостоятельное изучение учебной и научно литературы	Устный опрос (собеседование)	ПК-1.1, ПК-1.2
1.2 Методы решения задач молекулярной механики, методы минимизации энергии и интегрирования		6	12/6И		14	Подготовка к практическому занятию	Компьютерные лабораторные работы	ПК-1.1, ПК-1.2
Итого по разделу		12	20/10И		26			
2. Первопринципные и полуэмпирические методы моделирования наноструктур								
2.1 Описание первопринципных методов и используемых приближений	2	4	10/4И		12	Подготовка докладов по заранее обозначенным в рабочей программе дисциплины темам	Устный опрос (собеседование)	ПК-1.1, ПК-1.2
2.2 Описание полуэмпирических методов и используемых приближений		3	8/4И		10,95	Подготовка докладов по заранее обозначенным в рабочей программе дисциплины темам	Устный опрос (собеседование)	ПК-1.1, ПК-1.2
Итого по разделу		7	18/8И		22,95			
Итого за семестр		19	38/18И		48,95		зао,кр	
Итого по дисциплине		19	38/18И		48,95		курсовая работа, зачет с оценкой	

5 Образовательные технологии

Результат освоения дисциплины «Компьютерное моделирование наноструктур и их свойств» – 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 лабораторных 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. Мазалова, В. Л. Нанокластеры: рентгеноспектральные исследования и компьютерное моделирование / В.Л. Мазалова, А.Н. Кравцова, А.В. Солдатов. - Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2013. - 184 с. ISBN 978-5-9221-1457-8, 100 экз. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/852377>

б) Дополнительная литература:

1. Наноконпозиты на основе оксидов 3с1-металлов: исследования морфологии и структуры методами электронной микроскопии и рентгеновской спектроскопии : монография / Г. Э. Яловега и др. ; Южный федеральный университет. - Ростов-на-Дону ; Таганрог : Издательство Южного федерального университета, 2017. - 156 с. - ISBN 978-5-9275-2415-0.1020581. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1021546>

2. Величко, А. А. Методы исследования микроэлектронных и наноэлектронных материалов и структур. Часть II/Величко А.А., Филимонова Н.И. - Новосибирск : НГТУ, 2014. - 227 с.: ISBN 978-5-7782-2534-3. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/546528>

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 Office 2007 Professional	№ 135 от 17.09.2007	бессрочно

Borland Turbo Delphi	№112301 от 23.11.2005	бессрочно
ABC Pascal	свободно	бессрочно
MathCAD v.15 Education	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	https://magtu.informsystema.ru/Marc.html?locale=ru

9 Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Материально-техническое обеспечение дисциплины включает:

Материально-техническое обеспечение дисциплины включает:

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 работ:

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 результатов 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
ПК-1: Способен планировать и проводить экспериментальные исследования		
ПК-1.1	<p>Осуществляет проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований</p>	<p style="text-align: center;"><i>Перечень вопросов для подготовки к зачету:</i></p> <ol 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 40. Проблемы двухчастичных потенциалов 41. Многочастичные потенциалы для металлов 42. Эмпирические потенциалы межатомного взаимодействия для ковалентных систем 43. Потенциал Стиллинджера Вебера 44. Потенциалы Терзоффа 45. Потенциалы для описания взаимодействия между атомами углерода 46. Силы дальнего действия 47. Молекулярная динамика из первых принципов 48. Основные алгоритмы метода молекулярной динамики 49. Моделирование физической системы 50. Обрезание потенциала и коррекция дальнего диапазона 51. Периодические граничные условия 52. Критерий минимального образа 53. Геометрии с поверхностями 54. Алгоритм интегрирования уравнений движения по времени 55. Алгоритм Верлета 56. Алгоритм предиктор-корректор.

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		<p style="text-align: center;"><i>Вопросы для самопроверки:</i></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? 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
ПК-1.2	Осуществляет выполнение экспериментов и оформление результатов исследований и разработок	<p>Темы лабораторных работ</p> <ol 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 13. Моделирование процесса спекания монослойных и многослойных структур 14. Моделирование микроструктуры методом плотной

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		упаковки сфер 15. Моделирование фрактальных агрегатов 16. Моделирование диффузии идеального газа через монослойную мембрану 17. Моделирование диффузии идеального газа через многослойную мембрану 18. Моделирование диффузии по фрактальному агрегату

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.