

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт физики



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.

\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

*подписано электронно-цифровой подписью*

**Программа дисциплины**  
Компьютерный дизайн новых материалов БЗ.ДВ.2

Направление подготовки: 222000.62 - Инноватика

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Недопекин О.В.

**Рецензент(ы):**

Мокшин А.В.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Таюрский Д. А.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No 618918

Казань  
2018

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) заместитель директора по образовательной деятельности Недопекин О.В. Директорат Института физики Институт физики ,  
Oleg.Nedopekin@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Курс "Компьютерный дизайн новых материалов" представляет собой звено профессионального цикла предметов.

Целью обучения при изучении дисциплины "Компьютерный дизайн новых материалов" является формирование современных представлений об основных идеях, способах и возможностях методов компьютерного моделирования процессов и материалов.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б3.ДВ.2 Профессиональный" основной образовательной программы 222000.62 Инноватика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б.3 Цикл профессиональных дисциплин" и относится к обязательной части. Осваивается на четвертом курсе (7 семестр).

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-10 (общекультурные компетенции)	способностью критически переосмысливать свой социальный опыт
ОК-11 (общекультурные компетенции)	способностью следовать социально-значимым представлениям о здоровом образе жизни
ОК-12 (общекультурные компетенции)	способностью овладеть основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, иметь навыки работы с компьютером как средством управления информацией
ОК-7 (общекультурные компетенции)	способностью критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности ;
ОК-8 (общекультурные компетенции)	способностью следовать этическим и правовым нормам; толерантностью; способностью к социальной адаптации;
ПК-11 (профессиональные компетенции)	способностью к организации работы молодежных коллективов исполнителей
ПК-17 (профессиональные компетенции)	наличием навыков представлять и адаптировать знания с учетом уровня аудитории

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- современные методы моделирования свойств материалов

- теоретические основы методов моделирования. Их преимущества и недостатки
- основы высокопроизводительных вычислительных систем

2. должен уметь:

- пользоваться программными средами для моделирования свойств материалов
- оценивать время- и ресурсозатратность методов моделирования.
- делать выводы о свойствах материалов на основе результатов моделирования
- использовать полученные навыки на практике

3. должен владеть:

- навыками прогнозирования и оптимизации свойств материалов.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

- применять полученные навыки на практике.

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных(ые) единиц(ы) 180 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 7 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.	7	1	0	3	0	
2.	Тема 2. Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации.	7	2	0	3	0	
3.	Тема 3. Методы расчетов из первых принципов (ab initio). Методы Хартри-Фока.	7	3	0	3	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
4.	Тема 4. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): методы пост-Хартри-Фока.	7	4-5	0	6	0	
5.	Тема 5. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): теория функционала плотности.	7	6	0	3	0	
6.	Тема 6. Возможности ab initio методов: фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.	7	7-8	0	6	0	
7.	Тема 7. Возможности ab initio методов: оптические свойства, транспортные свойства. ИК и рамановские спектры.	7	9-10	0	6	0	
8.	Тема 8. Ограничения ab initio методов: точность, времязатратность, ресурсоемкость.	7	11	0	3	0	Контрольная работа
9.	Тема 9. Методы молекулярной динамики.	7	12-14	0	9	0	Контрольная работа
10.	Тема 10. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.	7	15-16	0	6	0	Контрольная работа
11.	Тема 11. Методы поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR).	7	17-18	0	6	0	Реферат
	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	Зачет
	Итого			0	54	0	

## 4.2 Содержание дисциплины

**Тема 1. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.**

***практическое занятие (3 часа(ов)):***

Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.

**Тема 2. Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации.**

***практическое занятие (3 часа(ов)):***

Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации.

**Тема 3. Методы расчетов из первых принципов (ab initio). Методы Хартри-Фока.**

***практическое занятие (3 часа(ов)):***

Методы Хартри-Фока.

**Тема 4. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): методы пост-Хартри-Фока.**

***практическое занятие (6 часа(ов)):***

Методы пост-Хартри-Фока.

**Тема 5. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): теория функционала плотности.**

***практическое занятие (3 часа(ов)):***

Теория функционала плотности.

**Тема 6. Возможности ab initio методов: фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.**

***практическое занятие (6 часа(ов)):***

Фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.

**Тема 7. Возможности ab initio методов: оптические свойства, транспортные свойства. ИК и рамановские спектры.**

***практическое занятие (6 часа(ов)):***

Оптические свойства, транспортные свойства. ИК и рамановские спектры.

**Тема 8. Ограничения ab initio методов: точность, времязатратность, ресурсоемкость.**

***практическое занятие (3 часа(ов)):***

Точность, времязатратность, ресурсоемкость.

**Тема 9. Методы молекулярной динамики.**

***практическое занятие (9 часа(ов)):***

Методы молекулярной динамики.

**Тема 10. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.**

***практическое занятие (6 часа(ов)):***

Методы Монте-Карло.

**Тема 11. Методы поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR).**

***практическое занятие (6 часа(ов)):***

Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR).

**4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.	7	1	- проработка теоретического материала (основная и дополнительная литература); -самостоятельное изу	7	Устный опрос
2.	Тема 2. Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации.	7	2	- проработка теоретического материала (основная и дополнительная литература); -самостоятельное изу	7	Самостоятельная работа
3.	Тема 3. Методы расчетов из первых принципов (ab initio). Методы Хартри-Фока.	7	3	- проработка теоретического материала (основная и дополнительная литература); -самостоятельное изу	7	Устный опрос
4.	Тема 4. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): методы пост-Хартри-Фока.	7	4-5	- проработка теоретического материала (основная и дополнительная литература); -самостоятельное изу	14	Самостоятельная работа
5.	Тема 5. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): теория функционала плотности.	7	6	- проработка теоретического материала (основная и дополнительная литература); -самостоятельное изу	7	Самостоятельная работа
6.	Тема 6. Возможности ab initio методов: фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.	7	7-8	- проработка теоретического материала (основная и дополнительная литература); -самостоятельное изу	14	Устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
7.	Тема 7. Возможности ab initio методов: оптические свойства, транспортные свойства. ИК и рамановские спектры.	7	9-10	- проработка теоретического материала (основная и дополнительная литература); -самостоятельное изу	14	Устный опрос
8.	Тема 8. Ограничения ab initio методов: точность, времязатратность, ресурсоемкость.	7	11	- проработка теоретического материала (основная и дополнительная литература); -самостоятельное изу	7	Контрольная работа
9.	Тема 9. Методы молекулярной динамики.	7	12-14	- проработка теоретического материала (основная и дополнительная литература); -самостоятельное изу	21	Контрольная работа
10.	Тема 10. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.	7	15-16	- проработка теоретического материала (основная и дополнительная литература); -самостоятельное изу	14	Контрольная работа
11.	Тема 11. Методы поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR).	7	17-18	- проработка теоретического материала (основная и дополнительная литература); -самостоятельное изу	14	Самостоятельная работа, реферат, экзамен
	Итого				126	

## 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Освоение дисциплины "" предполагает использование таких образовательных технологий, как лекции и практические занятия с использованием методических материалов, так и инновационных образовательных технологий с использованием в учебном процессе мультимедийных программ, включающих подготовку и выступления студентов на семинарских занятиях с фото-, аудио- и видеоматериалами по предложенной тематике.

На практических занятиях будут использоваться программные комплексы для моделирования свойств материалов и процессов, установленные на высокопроизводительные ЭВМ.



## **6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

### **Тема 1. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.**

Устный опрос , примерные вопросы:

Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.

### **Тема 2. Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации.**

Самостоятельная работа , примерные вопросы:

Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.

Высокопроизводительные вычислительные системы.

### **Тема 3. Методы расчетов из первых принципов (ab initio). Методы Хартри-Фока.**

Устный опрос , примерные вопросы:

Методы расчетов из первых принципов (ab initio). Методы Хартри-Фока.

### **Тема 4. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): методы пост-Хартри-Фока.**

Самостоятельная работа , примерные вопросы:

Методы расчета из первых принципов. Методы Хартри-Фока.

### **Тема 5. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): теория функционала плотности.**

Самостоятельная работа , примерные вопросы:

Теория функционала плотности.

### **Тема 6. Возможности ab initio методов: фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.**

Устный опрос , примерные вопросы:

Возможности ab initio методов: фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.

### **Тема 7. Возможности ab initio методов: оптические свойства, транспортные свойства. ИК и рамановские спектры.**

Устный опрос , примерные вопросы:

Возможности ab initio методов: оптические свойства, транспортные свойства. ИК и рамановские спектры.

### **Тема 8. Ограничения ab initio методов: точность, времязатратность, ресурсоемкость.**

Контрольная работа , примерные вопросы:

Методы расчета из первых принципов. Методы Хартри-Фока.

### **Тема 9. Методы молекулярной динамики.**

Контрольная работа , примерные вопросы:

Теория функционала плотности.

### **Тема 10. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.**

Контрольная работа , примерные вопросы:

Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.

### **Тема 11. Методы поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR).**

Самостоятельная работа, реферат, экзамен , примерные темы:

Методы поиска материалов с заданными свойствами. Темы рефератов: Моделирование и анализ физических свойств материалов.

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Самостоятельная работа-1. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур. Выскопроизводительные вычислительные системы.

Самостоятельная работа-2. Методы расчета из первых принципов. Методы Хартри-Фока

Самостоятельная работа-3. Теория функционала плотности.

Самостоятельная работа-4. Методы поиска материалов с заданными свойствами

Контрольная работа-1. Возможности и ограничения методов ab-initio

Контрольная работа-2. Методы молекулярной динамики

Контрольная работа-3. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.

Темы рефератов: Моделирование и анализ физических свойств материалов.

### **7.1. Основная литература:**

1. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: Учебное пособие.

Автор: Цирельсон В.Г. Издательство: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010

2. Электронные свойства и применение нанотрубок. Автор: Дьячков П.Н. Издательство:

БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011 г.

### **7.2. Дополнительная литература:**

1. Физика конденсированного состояния: учебное пособие. Авторы: Кузнецов В.М., Байков Ю.А. Издательство: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011 г.

2. Основы физики конденсированного вещества. Автор: Делоне Н.Б. Издательство: ФИЗМАТЛИТ, 2011 г.

### **7.3. Интернет-ресурсы:**

Васп - <http://www.vasp.at/>

Лампс - <http://lammmps.sandia.gov>

Лекция Оганова - <https://postnauka.ru/video/20749>

Материал дизайн - <http://www.materialsdesign.com/>

МГУ - <http://nuclphys.sinp.msu.ru/solidst/index.html#c>

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)**

Освоение дисциплины "Компьютерный дизайн новых материалов" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Занятия проводятся в специализированных аудиториях, оснащённых мультимедиа проектором, ноутбуком и экраном.

Практические занятия проводятся в специализированной вычислительной компьютерной лаборатории.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 222000.62 "Инноватика" и профилю подготовки не предусмотрено .

Автор(ы):

Недопекин О.В. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Мокшин А.В. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.