

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



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по образовательной деятельности КФУ
_____ Турилова Е.А.
"___" _____ 20__ г.

Программа дисциплины

Компьютерное моделирование и инжиниринг новых материалов

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Направленность (профиль) подготовки: Физика перспективных материалов

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2025

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и): доцент, к.н. Недопекин О.В. (Кафедра общей физики, Отделение физики), Oleg.Nedopekin@kpfu.ru ; доцент, к.н. Савостина Л.И. (Кафедра физики молекулярных систем, Отделение физики), Liudmila.Savostina@kpfu.ru ; Гумарова Ирина Ивановна

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-3	Способен применять знания в области информационных технологий, использовать современные компьютерные сети, программные продукты и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть "Интернет") для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки
ПК-1	Способен самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- современные методы моделирования свойств материалов
- теоретические основы методов моделирования. Их преимущества и недостатки
- основы высокопроизводительных вычислительных систем

Должен уметь:

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

Должен владеть:

- навыками прогнозирования и оптимизации свойств материалов.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- применять полученные навыки на практике.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.03 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 03.04.02 "Физика (Физика перспективных материалов)" и относится к части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 1 курсе в 2 семестре.

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) на 144 часа(ов).

Контактная работа - 64 часа(ов), в том числе лекции - 26 часа(ов), практические занятия - 38 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 80 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет с оценкой во 2 семестре.

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

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Се- местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само- стоя- тель- ная ра- бота
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи- ческие занятия, всего	Практи- ческие в эл. форме	Лабора- торные работы, всего	Лабора- торные в эл. форме	
1.	Тема 1. Основы квантово-химического моделирования: неэмпирический и DFT методы	2	4	0	6	0	0	0	8
2.	Тема 2. Физические основы квантово-химических расчетов ИК и оптических спектров, спектров комбинационного рассеяния	2	4	0	6	0	0	0	10
3.	Тема 3. Физические основы квантово-химических расчетов параметров спектров ЭПР и ЯМР	2	4	0	6	0	0	0	10
4.	Тема 4. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.	2	2	0	0	0	0	0	6
6.	Тема 6. Методы расчетов из первых принципов кристаллов.	2	2	0	0	0	0	0	6
7.	Тема 7. Методы расчетов из первых принципов. Фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.	2	4	0	10	0	0	0	20
10.	Тема 10. Методы молекулярной динамики.	2	4	0	6	0	0	0	10
11.	Тема 11. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.	2	2	0	4	0	0	0	10
	Итого		26	0	38	0	0	0	80

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Основы квантово-химического моделирования: неэмпирический и DFT методы

Основы квантово-химического моделирования: неэмпирический и DFT методы. Уравнение Шредингера. Приближения для многочастичных систем. Приближение Хартри-Фока. Уравнение Хартри-Фока-Рутаана. Учет электронной корреляции. Основные теоремы теории функционала плотности (DFT). Уравнения Кона-Шема. Базисные волновые функции: определение, состав и классификация. Функционалы плотности: определение, состав и классификация.

Тема 2. Физические основы квантово-химических расчетов ИК и оптических спектров, спектров комбинационного рассеяния

Физические основы квантово-химических расчетов оптических спектров: ИК, Раман, УФ, CD. Основные определения атомной и молекулярной спектроскопии: соотношение диапазона частот электромагнитных волн видам спектроскопии, условие резонанса, структура атомных и молекулярных уровней. Классическая теория испускания, поглощения и рассеяния излучения. Законы светопоглощения. Квантовомеханические основы происхождения спектров. Инфракрасные спектры: основные механизмы образования, правила отбора, квантово-химический подход к расчетам спектров. Спектры комбинационного рассеяния (Рамановские спектры): основные механизмы образования, правила отбора, квантово-химический подход к расчетам спектров. Спектры поглощения и люминесценции: основные механизмы образования, правила отбора, квантово-химический подход к расчетам спектров. Спектры кругового дихроизма: основные механизмы образования, правила отбора, квантово-химический подход к расчетам спектров.

Тема 3. Физические основы квантово-химических расчетов параметров спектров ЭПР и ЯМР

Физические основы квантово-химического расчета параметров спектров ЭПР и ЯМР. Основные положения спектроскопии ЯМР и ЭПР: квантово-механическое описание явлений, условия наблюдения явлений, правила отбора, механизмы релаксации (спин-решеточная и спин-спиновая), константа экранирования, химические сдвиги. Квантово-химический подход к расчетам параметров ЭПР и ЯМР спектров: выбор уровня теории, этапы вычисления.

Тема 4. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.

Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур. История и этапы развития компьютерных технологий и компьютерного моделирования. Достижения современной науки. История развития компьютеров и электронных устройств. Языки программирования и их развитие. Преимущества и недостатки компьютерного моделирования. Основные возможности и отличие от традиционного эксперимента.

Тема 6. Методы расчетов из первых принципов кристаллов.

Основные методы компьютерного моделирования и область их применения. Моделирование динамики атомов и молекул. Методы получения информации о межатомных взаимодействиях. Метод квантово-механических расчетов. Основные этапы моделирования методом ab-initio расчетов. Ограничения метода. Вычислительные пакеты. Входные и выходные параметры расчетов.

Тема 7. Методы расчетов из первых принципов. Фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.

Многочастичные системы и методы их изучения. Системы с несколькими степенями свободы. Проведение расчетов на примере молекулы водорода. Метод функционала плотности. Конечные температуры. Функционал плотности для нестационарных систем. Теория функционала плотности. Вычисление расчетов магнитных состояний веществ.

Тема 10. Методы молекулярной динамики.

Метод молекулярной динамики. Предсказание и расчет физических и механических свойств материалов. Моделирование динамики атомов и молекул. Основные этапы моделирования: теоретические основы, уравнения движения, интегрирование уравнений движения, краевые условия. Метод молекулярной динамики в дизайне новых материалов.

Тема 11. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.

Методы конструирования эффективных потенциалов межатомного/межмолекулярного взаимодействия на основе экспериментальных данных о структуре системы. Метод Монте-Карло моделирования. Методы ускорения расчетов на основе метода Монте-Карло. Обратный метод Монте-Карло моделирования. Виды методов Монте-Карло моделирования. Определение начальной конфигурации системы.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-99бин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

LAMMPS - <https://lammmps.sandia.gov/>

Materials design - <https://www.materialsdesign.com/>

VASP - <https://www.vasp.at/index.php/documentation>

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

– соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);

- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

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>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	При подготовке к лекционным занятиям, обучающимся необходимо заранее повторить пройденные ранее материалы. При необходимости можно воспользоваться основной и дополнительной литературой. Для конспектирования материала необходимо иметь общую тетрадь с числом страниц не менее 48 и ручку/карандаш. Рекомендуется активно участвовать в обсуждении нового материала. При возникновении вопросов/непонимания необходимо обратиться к преподавателю.
практические занятия	При подготовке к практическим занятиям, обучающимся необходимо повторить пройденный материал, воспользовавшись конспектами лекций, а также основной и дополнительной литературой. Для получения дополнительной информации также можно воспользоваться Интернет-ресурсами. Необходимо при себе иметь тетрадь с числом страниц не менее 12.
самостоятельная работа	Для организации самостоятельной работы и при подготовке к лабораторным занятиям обучающимся рекомендуется изучать дополнительную литературу по пройденным темам. Обучающиеся должны пользоваться конспектами лекций, своевременно выполнять аудиторные и домашние задания и уметь пользоваться Интернет-ресурсами.

Вид работ	Методические рекомендации
зачет с оценкой	Зачет проводится по итогам семестра перед сессией в письменной или устной форме, причем преподаватель может включать в него вопросы как практических занятий, так и лекционных. Дифференцированный зачет имеет пятибалльную оценку также, как и экзамен. Для сдачи зачета необходимо, прежде всего, выполнить все требования преподавателя. Нужно как можно раньше выяснить, какие вопросы предстоит готовить и каковы правила самой процедуры (учитывается ли посещаемость, надо ли пропущенные занятия отрабатывать, а если надо, то каким образом и т.д.).

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

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

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи;
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 03.04.02 "Физика" и магистерской программе "Физика перспективных материалов".

*Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.03 Компьютерное моделирование и инжиниринг новых
материалов*

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика
Профиль подготовки: Физика перспективных материалов
Квалификация выпускника: магистр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2025

Основная литература:

1. Компьютерное моделирование : учебник / В.М. Градов, Г.В. Овечкин, П.В. Овечкин, И.В. Рудаков. - Москва : КУРС : ИНФРА-М, 2023. - 264 с. - ISBN 978-5-906818-79-9. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.ru/catalog/product/1896364> (дата обращения: 18.03.2025). - Режим доступа: по подписке.
2. Булавин, Л. А. Компьютерное моделирование физических систем: учебное пособие / Л.А. Булавин, Н.В. Выгорницкий, Н.И. Лебовка. - Долгопрудный: Интеллект, 2011. - 352 с. ISBN 978-5-91559-101-0.- Текст: электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/398942> (дата обращения: 18.03.2025). - Режим доступа: по подписке.
3. Хливненко, Л. В. Практика нейросетевого моделирования : учебное пособие для вузов / Л. В. Хливненко, Ф. А. Пятакович. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 200 с. - ISBN 978-5-8114-8264-1. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/173811> (дата обращения: 18.03.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература:

1. Стефанова, И. А. Обработка данных и компьютерное моделирование : учебное пособие / И. А. Стефанова. - Санкт-Петербург: Лань, 2020. - 112 с. - ISBN 978-5-8114-4010-8. - Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/126939> (дата обращения: 18.03.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 384 с. - ISBN 978-5-8114-1032-3. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/210257> (дата обращения: 18.03.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

*Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.03 Компьютерное моделирование и инжиниринг новых
материалов*

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика перспективных материалов

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2025

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.