


МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой  
физики твердого тела и наноструктур

 (Домашневская Э.П.)  
31.08.2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Б1.В.15 Компьютерное моделирование физических процессов

**1. Код и наименование направления подготовки:**

03.04.02 Физика

**2. Профиль подготовки:**

Физика наносистем

**3. Квалификация (степень) выпускника: Магистр**

**4. Форма обучения: Очная**

**5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** кафедра физики твердого тела и наноструктур

**6. Составители программы:** Лихачев Е.Р., к.ф.-м.н.,

Дубровский О.И., кандидат физ.-мат наук, доцент

**7. Рекомендована:**

НМС физического факультета ВГУ протокол № 6 от 26.06.2019 г.

**8. Учебный год:** 2019-2020, 2020-2021

**Семестр(ы):** 2, 3

## 9. Цели и задачи учебной дисциплины:

*Цели учебной дисциплины* – подготовка обучающихся к решению научно-исследовательских задач с помощью компьютерного моделирования.

*Задачи учебной дисциплины:*

- ознакомиться с современными методами вычислительной физики и численного моделирования;
- сформировать умение проводить вычислительный эксперимент по профилю подготовки с использованием современных компьютерных технологий;
- познакомиться с современными программными пакетами для квантово-механических расчетов.

**10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:** Дисциплина «Компьютерное моделирование физических процессов» является дисциплиной по выбору вариативной части блока Б1.

**11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):**

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-5	способностью использовать свободное владение профессионально-профилированными знаниями в области компьютерных технологий для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами направленности (профиля) подготовки	знать: - основы современных вычислительных методов, применяемых в физике; уметь: - проводить вычислительный эксперимент с использованием современных компьютерных технологий; владеть: - профессионально-профилированными знаниями в области компьютерных технологий для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами направленности (профиля) подготовки.
ПК-2	способностью свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности	знать: - законы общей и теоретической физики, физики низкоразмерных систем; уметь: - использовать знание законов общей и теоретической физики, физики низкоразмерных систем для решения научно-инновационных задач; владеть: - разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач.

**12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.** – 4/144.

**Форма промежуточной аттестации** зачет, зачет с оценкой

## 13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		2 семестр	3 семестр	
Аудиторные занятия	40	28	12	
в том числе: лекции				
практические				
лабораторные	40	28	12	
Самостоятельная работа	104	80	24	
Форма промежуточной аттестации	зачет, зачет с оценкой	зачет	зачет с оценкой	
Итого:	144	108	36	

### 13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
<b>1. Лабораторные работы</b>		
1	Математическое моделирование и вычислительный эксперимент. Вычислительные задачи и алгоритмы	Место вычислительного эксперимента в физике наносистем. Этапы вычислительного эксперимента и их краткая характеристика. Общие рекомендации для построения эффективных алгоритмов.
2	Стандартные методы вычислений в физике	<p>Моделирование физических процессов, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями.</p> <p>Квазиклассическое квантование колебаний в молекуле. Потенциал Ленард-Джонса. Задача о рассеянии частиц в центральном поле.</p> <p>Алгоритм Эйлера решения задачи о теплообмене. Анализ устойчивости метода Эйлера. Колебательные системы. Простой гармонический осциллятор. Численное моделирование гармонического осциллятора с помощью алгоритма Эйлера-Кромера. Осциллятор с затуханием.</p> <p>Краевые задачи. Алгоритм Нумерова. Уравнение Пуассона. Алгоритм численного решения уравнения Пуассона и анализ его устойчивости.</p> <p>Собственные значения волнового уравнения. Задача о поперечных колебаниях натянутой струны с однородной плотностью. Метод шагового поиска. Алгоритм численного решения стационарного уравнения Шредингера с одномерным потенциалом. Прямоугольная потенциальная яма. Структура атома в приближении Хартри-Фока.</p> <p>Использование специальных функций математической физики. Рекурсия. Алгоритм вычисления полиномов Лежандра. Алгоритм вычисления цилиндрических функций Бесселя и анализ его устойчивости</p>
3	Моделирование электронных процессов в твердом теле	Электроны в периодическом потенциале. Вариационный метод Ритца. Построение кристаллических потенциалов. Метод присоединенных плоских волн и его практические аспекты. Линеаризация методов зонной теории. Метод псевдопотенциала.
4	Моделирование электронного строения наноструктур	Метод линеаризованных присоединенных плоских волн для пленок. Построение пленочного потенциала. Методика вычисления спектральных характеристик. Электронная структура нанотрубок в приближении слабой связи. Метод линеаризованных присоединенных цилиндрических волн.
5	Обзор современных программных пакетов моделирования электронной структуры материалов	<p>Знакомство с возможностями программного пакета Wien2k и его интерфейсом. Подготовка и ввод исходных данных для моделирования электронного строения кристаллических структур. Использование программы визуализации XCrysden.</p> <p>Знакомство с возможностями программного пакета Quantum ESPRESSO и его интерфейсом. Подготовка и ввод исходных данных для моделирования электронного строения кристаллических структур.</p> <p>Использование пакетов Wien2k и Quantum ESPRESSO для моделирования электронного строения наноструктур.</p>

### 13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Математическое моделирование и вычислительный эксперимент. Вычислительные задачи и алгоритмы.			4	12	16

2	Стандартные методы вычислений в физике			8	20	28
3	Моделирование электронных процессов в твердом теле			8	24	32
4	Моделирование электронного строения наноструктур.			8	24	32
5	Обзор современных программных пакетов моделирования электронной структуры материалов.			12	24	36
	Итого:			40	104	144

#### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Изучение дисциплины «Компьютерное моделирование физических процессов» предусматривает осуществление учебной деятельности, состоящей из двух частей: обучения студентов преподавателем и самостоятельной учебной деятельности студентов по изучению дисциплины.

Дисциплина «Компьютерное моделирование физических процессов» реализуется с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий. Самостоятельная работа студентов наряду с аудиторной представляет одну из форм учебного процесса и является существенной ее частью, что наиболее ярко представлено в процессе подготовки магистров. Последнее обусловлено тем, что самостоятельная работа предназначена для формирования навыков самостоятельной работы как вообще, так и в учебной, научной деятельности, формирование и развитие способности принимать на себя ответственность, самостоятельно решать проблему, находить конструктивные решения, выход из кризисной ситуации и т.д.

Самостоятельная работа формирует самостоятельность не только как совокупность умений и навыков, но и как черту характера, играющую существенную роль в структуре личности современного специалиста высшей квалификации. Она воспитывает самостоятельность как черту характера. Никакие знания, полученные на уровне пассивного восприятия, не ставшие объектом собственной умственной или практической работы, не могут считаться подлинным достоянием человека.

Давая возможность расширять и обогащать знания, умения по индивидуальным направлениям, самостоятельная работа студента позволяет создать разносторонних специалистов. В процессе самостоятельной работы развивают творческие возможности обучающегося, при этом самостоятельная работа завершает задачи всех видов учебной работы.

Самостоятельная работа - это планируемая работа студентов, выполняемая по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Преподаватель, ведущий занятия, организует, направляет самостоятельную работу студентов и оказывает им необходимую помощь. Однако самостоятельность студентов должна превышать объем работы, контролируемой преподавателем работы, и иметь в своей основе индивидуальную мотивацию обучающегося по получению знаний, необходимых и достаточных для будущей профессиональной деятельности в избранной сфере. Преподаватель при необходимости может оказывать содействие в выработке и коррекции данной мотивации, лежащей в основе построения самостоятельной деятельности студента по изучению дисциплины, получению необходимых знаний и навыков.

Получение образования предполагает обучение решению задач определенной сферы деятельности. Однако, как бы хорошо не обучались учащиеся способам решения задач в аудитории, сформировать средства практической деятельности не удастся, так как каждый случай практики особый и для его решения следует выработать особый профессиональный стиль мышления.

Результат обучения и самостоятельной работы студента предполагает наличие следующих составляющих:

- понимание методологических основ построения изучаемых знаний;
- выделение главных структур учебного курса;
- формирование средств выражения в данной области;
- построение методик решения задач и ориентации в проблемах (ситуациях).

В учебном процессе используются следующие образовательные технологии (по образовательным формам): лабораторные и индивидуальные занятия. По преобладающим методам и приемам обучения: объяснительно-иллюстративные (объяснение, показ-демонстрация учебного материала и др.); активные (анализ учебной и научной литературы, составление схем и др.) и интерактивные, в том числе и групповые (взаимное обучение в форме подготовки и обсуждения докладов); информационные; компьютерные; мультимедийные (работа с сайтами академических структур, научно-исследовательских организаций, электронных библиотек и др., разработка презентаций, сообщений и докладов, работа с электронными обучающими программами и т.п.).

Студентам, чтобы хорошо овладеть учебным материалом, необходимо выработать навыки правильной и планомерной работы. Перед началом лабораторных занятий надо просмотреть все, что было сделано в предыдущий раз. Это позволит сосредоточить внимание и восстановить в памяти уже имеющиеся знания по данному предмету. Кроме того, такой метод поможет лучше запомнить как старое, так и новое, углубит понимание того и другого, так как при этом устанавливаются связи нового со старым, что является не только обязательным, но и основным условием глубокого овладения материалом. Чем детальнее изучаемое ассоциируется с известным ранее, тем прочнее сохраняется в памяти и быстрее вспомнить, когда требуется.

Приступая к изучению нового материала, необходимо сосредоточиться, т.е. сконцентрировать внимание и не отвлекаться от выполняемой работы, помня, что желание запомнить является гарантией успешной работы, отсутствие же воли к запоминанию снижает эффект восприятия.

Следует помнить о том, что через лабораторные занятия передается не только систематизированный теоретический материал, но и постигается методика научного исследования и умение самостоятельно работать, анализировать различного рода явления.

При этом хорошо овладеть содержанием дисциплины – это:

- знать тему;
- понимать значение и важность ее в данном курсе;
- четко представлять план;
- уметь выделить основное, главное;
- усвоить значение примеров и иллюстраций;
- связать вновь полученные сведения о предмете или явлении с уже имеющимися;
- представлять возможность и необходимость применения полученных сведений.

Самостоятельная работа студента при изучении дисциплины «Компьютерное моделирование физических процессов» включает в себя: подготовку и участие в изучении теоретической части курса, выполнение рефератов, подбор, изучение, анализ и конспектирование рекомендованной литературы, подготовку к зачету.

## **15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины**

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х ч.) / Х. Гулд – М.: Мир, 1990. – 349 с. (1 ч.), 400 с. (2 ч.).
2	Ибрагимов И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем. / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. – СПб.: Изд-во "Лань", 2010. – 384 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
-------	----------

3	Дегтяренко Н.Н. Описание программных пакетов для квантовых расчетов наносистем / Н.Н. Дегтяренко. – М.: МИФИ, 2008. – 180 с.
4	Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. / Е.В. Бутырская. – М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2011. – 224 с.
5	Соловьев М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. - М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2005. – 536 с.
6	Курганский С.И. Электронная структура тонких пленок сложных металлооксидов [Текст]: дис. докт. физ.-мат. наук / С.И. Курганский ; Воронежский гос. ун-т. - Воронеж, 1996. - 261 с.
7	Электронная структура конденсированных сред / Кацнельсон А.А. [и др.]. - М.: Изд-во МГУ, 1990. – 237 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)\*:

№ п/п	Ресурс
8.	<a href="http://www.lib.vsu.ru">http://www.lib.vsu.ru</a> – Зональная научная библиотека ВГУ
9.	<a href="http://www.moodle.vsu.ru">http://www.moodle.vsu.ru</a>
10.	<a href="https://elibrary.ru">https://elibrary.ru</a> – Научная электронная библиотека
11.	<a href="https://lanbook.com">https://lanbook.com</a> – ЭБС «Лань»
12.	<a href="https://biblioclub.ru">https://biblioclub.ru</a> – ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
13.	<a href="http://www.iprbookshop.ru">www.iprbookshop.ru</a> – ЭБС «IPRbooks»
14.	<a href="https://edu.vsu.ru">https://edu.vsu.ru</a> □ Образовательный портал "Электронный университет ВГУ"

\* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договора у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы

## 16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	Программный пакет Wien2K: учебно-методическое пособие. Ч. 1. Моделирование электронной структуры кристаллов. Зонная структура и плотность состояний / М.Д. Манякин и др. - Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2015. – 33 с.

## 17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

№ п/п	Источник
1	<a href="http://www.lib.vsu.ru">http://www.lib.vsu.ru</a> – ЗНБ ВГУ
2	<a href="http://www.moodle.vsu.ru">http://www.moodle.vsu.ru</a>
3	<a href="https://elibrary.ru">https://elibrary.ru</a> – Научная электронная библиотека
4	<a href="https://lanbook.com">https://lanbook.com</a> – ЭБС «Лань»
5	<a href="https://biblioclub.ru">https://biblioclub.ru</a> – ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
6	<a href="http://www.iprbookshop.ru">www.iprbookshop.ru</a> – ЭБС «IPRbooks»
7	<a href="https://edu.vsu.ru">https://edu.vsu.ru</a> □ Образовательный портал "Электронный университет ВГУ"

## 18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Лаборатория компьютерных технологий, САПР и математического моделирования кафедры физики твердого тела и наноструктур.

Реализация дисциплины с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий осуществляется через образовательный портал "Электронный университет ВГУ".

## 19. Фонд оценочных средств:

### 19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наиме-	ФОС* (средства оценивания)

		нование)	
ОПК-5	Знать: основы современных вычислительных методов, применяемых в физике	1-5	Лабораторные работы
	Уметь: проводить вычислительный эксперимент с использованием современных компьютерных технологий	1-5	Лабораторные работы
	Владеть: профессионально-профилированными знаниями в области компьютерных технологий для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами направленности (профиля) подготовки	1-5	Лабораторные работы
ПК-2	Знать: законы общей и теоретической физики, физики низкоразмерных систем	1-5	Лабораторные работы
	Уметь: использовать знание законов общей и теоретической физики, физики низкоразмерных систем для решения научно-инновационных задач;	1-5	Лабораторные работы
	Владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач	1-5	Лабораторные работы
<b>Промежуточная аттестация</b>			<b>КИМ</b>

## 19.2. Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине – зачет (2 семестр), зачет с оценкой (3 семестр).

Оценка уровня освоения дисциплины «Компьютерное моделирование физических процессов» осуществляется по следующим показателям:

- качество выполнения студентом лабораторных работ;
- качество материалов, представленных в отчетах студента по лабораторным работам;
- полнота и качество ответов студента на вопросы при текущем контроле - собеседование, отчет по лабораторной работе, защита лабораторных работ.

Для оценивания результатов обучения на зачете используется – "зачтено", "не зачтено"; на зачете с оценкой - «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Критерии оценки освоения дисциплины «Компьютерное моделирование физических процессов»:

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач при выполнении лабораторных работ	<i>Повышенный уровень</i>	<i>Отлично</i>
Обучающийся владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), допускает незначительные ошибки при выполнении лабораторных работ и ответах на вопросы при текущем контроле	<i>Базовый уровень</i>	<i>Хорошо</i>
Обучающийся владеет частично теоретическими основами дисциплины, фрагментарно способен выполнять лабораторные задания, допускает ошибки при ответах на вопросы при текущем контроле	<i>Пороговый уровень</i>	<i>Удовлетворительно</i>
Неудовлетворительное выполнение лабораторных работ. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные теоретические знания, низкое качество работы при выполнении лабораторных заданий, допускает грубые ошибки при ответах на вопросы при текущем контроле	–	<i>Неудовлетворительно</i>

Отметка *зачтено* выставляется в случае, когда работа студента соответствует повышенному, базовому или пороговому уровню сформированности компетенций. Отметка *не зачтено* выставляется в случае несформированности компетенций.

### **19.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы**

#### **19.3.2 Перечень практических заданий**

1. Моделирование рассеяния частиц в центральном поле.
2. Решение задачи о теплообмене с помощью алгоритма Эйлера.
3. Численное моделирование гармонического осциллятора с помощью алгоритма Эйлера-Кромера.
4. Алгоритм численного решения уравнения Пуассона и анализ его устойчивости.
5. Задача о поперечных колебаниях натянутой струны с однородной плотностью.
6. Алгоритм численного решения стационарного уравнения Шредингера с одномерным потенциалом.
7. Моделирование энергетического спектра электрона в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.
8. Компьютерное моделирование электронной структуры кристалла с помощью метода ЛППВ.
8. Компьютерное моделирование электронной структуры кристалла с помощью метода псевдопотенциала.
9. Компьютерное моделирование электронной структуры нанопленки с помощью плёночного метода ЛППВ.
10. Компьютерное моделирование электронной структуры нанотрубки с помощью метода ЛПЦВ.
11. Расчет электронного строения кристалла с помощью программного пакета Wien2k.
12. Расчет электронного строения кристалла с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO.

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

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме собеседования при выполнении лабораторных работ.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя 12 лабораторных работ.

При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.

Программа рекомендована НМС физического факультета протокол № 6 от 26.06.2019