

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

УТВЕРЖДАЮ
заведующий кафедрой
физики твердого тела и наноструктур
(П.В.Середин)
05.06.2023г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.01.02 Компьютерный эксперимент в физике

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

7. Рекомендована:

НМС физического факультета ВГУ от 25.05.23 г. протокол №5

8. Учебный год: 2023-2024

Семестр: 2

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Цели учебной дисциплины – подготовка обучающихся к решению научно-исследовательских задач по профилю подготовки с помощью вычислительного эксперимента.

Задачи учебной дисциплины:

- формирование умений по поиску необходимой научной информации и эффективной работы с ней;
- изучение основных методов вычислительной физики и численного моделирования и особенностей их использования;
- ознакомление с современными программными пакетами для квантово-механических расчетов в области физики конденсированного состояния;
- сформировать умение проводить вычислительный эксперимент по профилю подготовки с использованием современных компьютерных технологий;
- ознакомление обучающихся с правилами оформления и представления результатов исследования.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: Дисциплина «Компьютерный эксперимент в физике» является дисциплиной по выбору в части, формируемой участниками образовательных отношений, блок Б1.

В результате прохождения данной дисциплины обучающийся должен приобрести знания, умения, навыки профессиональных компетенций, необходимых для обеспечения трудовых функций профессиональных стандартов:

40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам»

– В/02.6 «Проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований»;

40.006 «Инженер-технолог в области производства наноразмерных полупроводниковых приборов и интегральных схем»

– В/01.7 «Разработка технологических процессов и внедрение их в производство»;

– В/02.7 «Оптимизация параметров технологических операций».

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

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК-1	Осуществляет проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований	ПК-1.1	Проводит работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований, выполнению экспериментов	Знать: способы обработки и анализа научно-технической информации и результатов исследований Уметь: проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований, выполнению экспериментов Владеть: навыками обработки и анализа научно-технической информации и результатов исследований, выполнения экспериментов
		ПК-1.3	Оформляет результаты исследований и разработок, готовит элементы документации проведения отдельных этапов работ	Знать: средства оформления результатов исследований и разработок, подготовки элементов документации проведения отдельных этапов работ

				<p>Уметь: оформлять результаты исследований и разработок, готовить элементы документации проведения отдельных этапов работ</p> <p>Владеть: навыками оформления результатов исследований и разработок, подготовки элементов документации проведения отдельных этапов работ</p>
ПК-3	Участвует в разработке технологических процессов, их оптимизации и внедряет их в производство	ПК-3.2	Применяет методы физико-математического моделирования процессов и изделий электроники и наноэлектроники	<p>Знать: физические и математические законы, лежащие в основе методов, применяемых для моделирования физических процессов</p> <p>Уметь: применять методы физико-математического моделирования процессов</p> <p>Владеть: навыками применения методов физико-математического моделирования процессов</p>

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. – 3/108.

Форма промежуточной аттестации: зачет

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость	
		Всего	По семестрам 2 семестр
Аудиторные занятия		32	32
в том числе:	лекции		
	практические		
	лабораторные	32	32
	групповые консультации		
Самостоятельная работа		76	76
Форма промежуточной аттестации – зачет			
Итого:		108	108

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лабораторные занятия		
1.1	Технология поиска и сбора информации. Место вычислительного эксперимента в физике.	Лабораторная работа 1. Использование сети Интернет для поиска научно-технической информации
1.2	Общие рекомендации для построения эффективных алгоритмов	Лабораторная работа 2. Алгоритм численного решения уравнения Пуассона и анализ его устойчивости
1.3	Обзор современных программных пакетов моделирования электронной структуры материалов	Лабораторная работа 3. Основы работы с программой-визуализатором XCrysden. Лабораторная работа 4. Основы работы с программным пакетом Quantum Espresso Лабораторная работа 5. Основы работы с программным пакетом Wien2k

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Технология поиска и сбора информации. Место вычислительного эксперимента в физике.			2	4	6
2	Общие рекомендации для построения эффективных алгоритмов			18	36	54
3	Обзор современных программных пакетов моделирования электронной структуры материалов			12	36	48
	Итого:			32	76	108

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Изучение дисциплины «Компьютерный эксперимент в физике» предусматривает осуществление учебной деятельности, состоящей из двух частей: обучения студентов преподавателем и самостоятельной учебной деятельности студентов по изучению дисциплины.

В учебном процессе используются следующие образовательные технологии. По образовательным формам: лабораторные занятия; индивидуальные занятия. По преобладающим методам и приемам обучения: 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.).

Лабораторное занятие является эффективной формой организации учебного процесса в высшем учебном заведении, которая основывается на самостоятельной работе студентов. Лабораторные занятия не только закрепляют теоретические знания, но и позволяют студенту глубоко изучать механизм применения этих знаний, овладеть важным для специалиста умением интеллектуального проникновения в те процессы, которые исследуют на лабораторном занятии. Под влиянием этой формы занятий студентов часто возникают новые идеи научного и технического характера, которые используются в курсовых, квалификационных, дипломных работах. Лабораторные занятия в значительной степени обеспечивают отработку умений и навыков принятия практических решений в научной и производственной деятельности.

Приступая к работе в лаборатории, студенту следует знать, что любое несоблюдение расписания занятий и дисциплины будет считаться нарушением его служебных обязанностей. Преподаватель, который впервые встречается со студентами на вводном занятии, должен ознакомить их с общими правилами работы в лаборатории, которые они обязаны неукоснительно выполнять.

Успех проведения конкретного лабораторного занятия зависит от его подготовки, которая включает: глубокое изучение студентами теоретического материала; подготовку необходимой учебно-материальной базы и документации (инструкций, методических разработок и т.п.); подготовку преподавателя и студентов. Подготовку к лабораторному занятию осуществляют в несколько этапов: предварительная подготовка, начало работы, ее выполнение, составление отчета и оценки работы преподавателем.

Предварительную подготовку к работе в лаборатории осуществляют в отведенное для самостоятельной работы время. Готовясь к ней, студент прежде всего должен осо-

знать ее цель, усвоить теоретический материал, добиться четкого представления о физических процессах, которые исследуются на лабораторном занятии.

С целью качественного выполнения лабораторной работы преподаватели проверяют готовность студентов. Это происходит в форме беседы с каждым студентом, в процессе которой выявляют знания теоретического материала по теме работы, или в форме компьютерного тестирования по этим же вопросам. Таким образом выявляют уровень теоретической подготовки студентов, практические навыки, умение применять знания для решения практических задач.

После экспериментальной части работы студенты должны ответить на контрольные вопросы, преподаватель использует для оценки знаний и экспериментальных умений и навыков студента при зачете его работы.

Следовательно, проведение занятия предусматривает следующие этапы: предварительный контроль подготовленности студентов к выполнению конкретной лабораторной работы; выполнения конкретных задач в соответствии с предложенной тематикой: оформление индивидуального отчета; оценивания преподавателем результатов работы студентов.

Завершается лабораторная работа оформлением индивидуального отчета и его защитой перед преподавателем. Итоговые оценки выставляют в журнале учета выполнения лабораторных работ и учитывают при выставлении семестровой итоговой оценки по дисциплине.

Самостоятельная работа обучающихся 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 обучающегося 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 обучающихся, выполняемая по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Преподаватель, ведущий занятия, организует, направляет самостоятельную работу обучающихся и оказывает им необходимую помощь. Однако самостоятельность обучающихся 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 обучающегося по изучению дисциплины, получению необходимых знаний и навыков.

Результат обучения и самостоятельной работы обучающегося 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).

Самостоятельная работа студента при изучении дисциплины «Компьютерный эксперимент в физике»:

подготовку к лабораторным занятиям	– 38 часов
написание отчетов по лабораторным работам	– 38 часов
итого	– 76 часов

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

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Павлова, Т.Ю. Вычислительный эксперимент и подготовка научной публикации : учебное пособие / Т.Ю. Павлова, И.А. Сергеева. – Кемерово: КемГУ, 2009. – 84 с. - Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/30166
2.	Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х ч.) / Х. Гулд, Я. Тобочник – М.: Мир, 1990. – 349 с. (1 ч.), 400 с. (2 ч.). – Режим доступа: https://www.studmed.ru/guld-h-tobochnik-ya-kompyuternoe-modelirovanie-v-fizike-chasti-1-2_82e0a14b154.html
3.	Манякин, М.Д. Программный пакет Wien2K. Часть 1. Моделирование электронной структуры кристаллов. Зонная структура и плотность состояний: учебно-методическое пособие / М.Д. Манякин, О.И. Дубровский, Е.Р. Лихачев, С.И. Курганский // Воронежский государственный университет. - Воронеж. - 2015- 48 с. – URL : http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m15-265.pdf

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4.	Губина Т.Н. Учебно-методическое пособие по дисциплине «Компьютерное моделирование» : учебное пособие / Т.Н. Губина, И.Н. Тарова ; Министерство образования Российской Федерации, Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина. – Елец: Елецкий государственный университет им. И. А. Бунина, 2004. – 155 с. – Режим доступа: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=272142
5.	Поттер Д. Вычислительные методы в физике / Д. Поттер. – М.: Мир, 1975. – 395 с. – Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=457033
6.	Поршнева, С. В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB : учебное пособие / С. В. Поршнева. - Санкт-Петербург: Лань, 2021. - 736 с. - Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/167842
7.	Кунин С. Вычислительная физика / С. Кунин. – М.: Мир, 1992. – 518 с.
8.	Курганский, С.И. Задачи по численным методам. Учебно-методическое пособие для вузов / С.И. Курганский, О.И. Дубровский, Е.Р. Лихачев // Воронежский государственный университет. – Воронеж. – 2013. - 33 с. – URL : https://lib.vsu.ru/zgate?present+5585+default+61+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus

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

№ п/п	Ресурс
9.	http://www.lib.vsu.ru – Зональная научная библиотека ВГУ
10.	https://edu.vsu.ru – Образовательный портал «Электронный университет ВГУ»
11.	https://biblioclub.ru – ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
12.	https://e.lanbook.com – ЭБС «Лань»
13.	https://lib.rucont.ru – ЭБС Национальный цифровой ресурс «РУКОНТ»
14.	https://www.studentlibrary.ru – ЭБС «Консультант студента»
15.	https://www.iprbookshop.ru – ЭБС «IPRbooks»

16.	https://www.znaniium.com – ЭБС «Znaniium.com»
17.	https://www.quantum-espresso.org – сайт проекта Quantum ESPRESSO
18.	http://www.xcrysden.org – официальный сайт XCrysDen

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
19.	Курганский, С.И., Вычислительные методы для физиков. Часть 1. Аппроксимация функций, численное дифференцирование / С.И Курганский, О.И. Дубровский, Л.И. Куркина. – Воронежский государственный университет. - 1998. - 24 с.
20.	Курганский, С.И. Вычислительные методы для физиков. Часть 2. Численное интегрирование, численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / С.И Курганский, О.И. Дубровский, Л.И. Куркина. – Воронежский государственный университет. - 1999. - 32 с.
21.	Курганский С.И. Вычислительные методы для физиков. Часть 3. Численные методы линейной алгебры, методы решения нелинейных уравнений / С.И Курганский, О.И. Дубровский, Л.И. Куркина. – Воронежский государственный университет. - 1999. - 16 с.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

В учебном процессе используются следующие образовательные технологии. По образовательным формам: лекции; лабораторные работы, групповые консультации, 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.).

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Лабораторные работы выполняются в лаборатории компьютерных технологий, САПР и математического моделирования кафедры физики твердого тела и наноструктур: Компьютеры Pentium Intel Core i7 - 6 шт., компьютеры Pentium Intel Core Duo - 8 шт. с лицензионным программным обеспечением: Microsoft Windows 7, договор 3010-15/207-19 от 30.04.2019; программный пакет Wien2k, рег. № лицензии W2k-3039, и свободно распространяемым программным обеспечением:

Lazarus (GNU General Public License (GPL), бесплатное и/или свободное ПО, лицензия: <https://www.lazarus-ide.org/index.php>);

LibreOffice (GNU Lesser General Public License (LGPL), бесплатное и/или свободное ПО, лицензия: <https://ru.libreoffice.org/about-us/license/>);

Quantum Espresso (GNU General Public License (GPL), бесплатное и/или свободное ПО, лицензия: https://www.quantum-espresso.org/Doc/user_guide/node6.html);

XCrysDen (GNU General Public License (GPL), бесплатное и/или свободное ПО, лицензия: <http://www.xcrysden.org/License.html>).

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Технология поиска и сбора информации. Место вычислительного эксперимента в физике.	ПК-1	ПК-1.1	Лабораторная работа 1
2.	Общие рекомендации для построения эффективных алгоритмов	ПК-3	ПК-3.2	Лабораторная работа 2
3.	Обзор современных программных пакетов моделирования электронной структуры материалов	ПК-1, ПК-3	ПК-1.1 ПК-1.3 ПК-3.2	Лабораторные работы 3 – 5
Промежуточная аттестация форма контроля - зачет				Текущий контроль успеваемости

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Текущий контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: собеседование при выполнении лабораторных работ.

Перечень тем лабораторных работ

Лабораторная работа 1. Использование сети Интернет для поиска научно-технической информации

Лабораторная работа 2. Алгоритм численного решения уравнения Пуассона и анализ его устойчивости

Лабораторная работа 3. Основы работы с программой-визуализатором XCrysden.

Лабораторная работа 4. Основы работы с программным пакетом Quantum Espresso

Лабораторная работа 5. Основы работы с программным пакетом Wien2k

Для текущего контроля успеваемости используется устный опрос, отчеты о ходе выполнения лабораторных работ, на основе которых выставляется предварительная оценка *отлично/хорошо/удовлетворительно/неудовлетворительно*.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала предварительных 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	Повышенный уровень	Отлично
Обучающийся владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), допус-	Базовый уровень	Хорошо

кает незначительные ошибки при выполнении лабораторных работ и ответах на вопросы при текущем контроле		
Обучающийся владеет частично теоретическими основами дисциплины, фрагментарно способен выполнять лабораторные задания, допускает ошибки при ответах на вопросы при текущем контроле	Пороговый уровень	Удовлетворительно
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	–	Неудовлетворительно

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине – зачет.

Оценка уровня освоения дисциплины «Компьютерный эксперимент в физике» 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, отчёт по лабораторной работе, защита лабораторных работ.

Оценка на зачете выставляется по результатам текущей аттестации (критерии оценивания приведены выше). Отметка *зачтено* выставляется в случае, когда работа студента соответствует повышенному, базовому или пороговому уровню сформированности компетенций. Отметка *не зачтено* выставляется в случае несформированности компетенций.