

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

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
Физики твердого тела и наноструктур
 (П.В.Середин)
31.08.2024г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.0.09 Компьютерные технологии в научных исследованиях

1. Код и наименование направления подготовки/специальности: 11.04.04

Электроника и нанoeлектроника

2. Профиль подготовки/специализация:

Интегральная электроника и нанoeлектроника

3. Квалификация выпускника: Магистр

4. Форма образования: очная

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

6. Составители программы: Борщ Надежда Алексеевна,
кандидат физ.-мат. наук, доцент

7. Рекомендована: НМС физического факультета протокол №6 от 26.06.2024

8. Учебный год: 2024–2025

Семестр: 1

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целями освоения учебной дисциплины являются:

систематизация знаний обучающихся по современным программным средствам поддержки НИР на всех этапах их выполнения, теоретическое и практическое освоение компьютерных и информационных технологий сбора, обработки и анализа фактического материала для научных исследований, закрепление представлений о легитимности и корректности использования ресурсов глобальной компьютерной сети в научной и творческой деятельности.

В результате прохождения данной дисциплины обучающийся должен приобрести знания, умения, навыки общепрофессиональных компетенций, необходимых для обеспечения трудовых функций ... вписать из приложения 2

познакомить обучающихся с правилами оформления и представления результатов исследования и проектирования, технологией работы на ПК в современных операционных средах, основными методами разработки алгоритмов и программ, структуры данных, используемые для представления типовых информационных объектов, типовые алгоритмы обработки данных;

- формирование представлений об элементах начертательной геометрии и инженерной графики, геометрического моделирования, программных средствах компьютерной графики;
- рассмотреть принципы построения глобальных и локальных компьютерных сетей, новые Интернет технологий;
- изучить типовые процедуры применения проблемно-ориентированных прикладных программных средств в профессиональных дисциплинах и сферах профессиональной деятельности;
- формирование умений по поиску необходимой научной информации и эффективной работы с ней, свободно ориентироваться в изучаемой проблеме, представлять, докладывать и аргументированно защищать результаты проектирования;
- решать задачи обработки данных с помощью современных инструментальных средств конечного пользователя;
- применять интерактивные графические системы для выполнения и редактирования изображений и чертежей;
- формирование навыков использования современных информационных и компьютерных технологий, средств коммуникации, способствующих повышению эффективности научной и образовательной сфер деятельности;
- овладеть программными продуктами оформления и представления результатов проектирования; методами оформления литературного обзора, качественных и количественных результатов исследований, навыками презентации материалов для публикации, средствами профессионального изложения специальной информации, научной аргументации и презентации результатов исследований;
- изучить методы построения современных проблемно-ориентированных прикладных программных средств;
- овладеть современными программными средствами моделирования свойств функциональных материалов электроники и нанoeлектроники.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: обязательная часть блока Б1.

При изучении дисциплины студент закрепляет знания, умения и навыки, полученные при изучении математических и общепрофессиональных дисциплин и получает знания, умения и навыки, необходимые при изучении специальных дисциплин.

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
ОПК-3	Способен приобретать и использовать новую информацию в своей предметной области, предлагать новые идеи и подходы к решению инженерных задач	ИД-1ОПК-3	Знает принципы построения локальных и глобальных компьютерных сетей, основы Интернет-технологий, типовые процедуры применения проблемно-ориентированных прикладных программных средств в дисциплинах профессионального цикла и профессиональной сфере деятельности	Знать: принципы построения локальных и глобальных компьютерных сетей, основы Интернет-технологий, типовые процедуры применения проблемно-ориентированных прикладных программных средств в дисциплинах профессионального цикла и профессиональной сфере деятельности
		ИД-2ОПК-3	Умеет использовать современные информационные и компьютерные технологии, средства коммуникаций, способствующие повышению эффективности научной и образовательной сферы деятельности	Уметь: использовать современные информационные и компьютерные технологии, средства коммуникаций, способствующие повышению эффективности научной и образовательной сферы деятельности
ОПК-4	Способен разрабатывать и применять специализированное программно-математическое обеспечение для проведения исследований и решения инженерных задач:	ИД-1ОПК-4	Знает методы расчета, проектирования, конструирования и модернизации электронной компонентной базы с использованием систем автоматизированного проектирования и компьютерных средств	Знать: методы расчета, проектирования, конструирования и модернизации электронной компонентной базы с использованием систем автоматизированного проектирования и компьютерных средств
		ИД-2ОПК-4	Умеет осуществлять выбор наиболее оптимальных прикладных программных пакетов для решения соответствующих задач научной и образовательной деятельности	Уметь: осуществлять выбор наиболее оптимальных прикладных программных пакетов для решения соответствующих задач научной и образовательной деятельности
		ИД-3ОПК-4	Владеет современными программными средствами (CAD) моделирования, оптимального проектирования и конструирования приборов, схем и устройств электроники и нанoeлектроники различного функционального назначения	Владеть: современными программными средствами (CAD) моделирования, оптимального проектирования и конструирования приборов, схем и устройств электроники и нанoeлектроники различного функционального назначения

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 4 / 144.

Форма промежуточной аттестации Экзамен

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость			
		Всего	По семестрам		
			1 семестр	№ семестра	...
Аудиторные занятия		30	30		
в том числе:	лекции				
	практические				
	лабораторные	30	30		
Самостоятельная работа		78	78		
в том числе: курсовая работа (проект)					
Форма промежуточной аттестации (экзамен – ___ час.)		36	36		
Итого:		144	144		

Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью он-лайн-курса, ЭУМК *
1. Лабораторные занятия			
1.1	Технология поиска и сбора информации	Лабораторная работа 1. Поиск литературных источников по тематике исследования Лабораторная работа 2. Использование сети Интернет для поиска научной-технической информации	—
1.2	Компьютерные технологии в научной деятельности	Лабораторная работа 3. Научные и инженерные расчёты с применением MatLab Лабораторная работа 4. Компьютерная графика в научных исследованиях. Лабораторная работа 5. Компьютерное моделирование электронной структуры кристаллов с помощью программного пакета Abinit Лабораторная работа 6. Компьютерное моделирование электронной структуры кристаллов с помощью программного пакета Quantum Espresso Лабораторная работа 7. Компьютерное моделирование электронной структуры кристаллов с помощью программного пакета Wien2k	—
1.3	Подготовка и представление результатов научных исследований	Лабораторная работа 8. Использование средств компьютерных технологий для подготовки публикаций Лабораторная работа 9. Представление результатов научных исследований средствами ИКТ	—

Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				Всего
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	
1	Технология поиска и сбора информации			4	6	10
2	Компьютерные технологии в научной деятельности			20	60	80

3	Подготовка и представление результатов научных исследований			6	12	18
	Итого:			30	78	108

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Изучение дисциплины «Компьютерные технологии в научных исследованиях» предусматривает осуществление учебной деятельности, состоящей из двух частей: обучения студентов преподавателем и самостоятельной учебной деятельности студентов по изучению дисциплины.

Дисциплина «Компьютерные технологии в научных исследованиях» реализуется с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий.

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 осознать 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: оформ-

ление 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 бакалавров. 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 обучающихся при изучении «Компьютерных технологий в научных исследованиях» включает в себя: подготовку к выполнению лабораторных работ, подготовку к экзамену.

Самостоятельная работа студента при изучении дисциплины «Компьютерные технологии в научных исследованиях» включает в себя:

подготовку к лабораторным занятиям	– 58 часов
написание отчетов по лабораторным работам	– 20 часов итого

Подготовка к экзамену – 36 часов

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

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Косова, Е.Н. Компьютерные технологии в научных исследованиях [Электронный ресурс] : учебное пособие / Е.Н. Косова, К.А. Катков, О.В. Вельц и др. - Ставрополь: СКФУ, 2015. - 241 с. - Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=457395
2.	Изюмов, А.А. Компьютерные технологии в науке и образовании [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.А. Изюмов, В.П. Коцюбинский. - Томск: Эль Контент, 2012. - 150 с. - Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208648
3.	Кручинин, В.В. Компьютерные технологии в науке, образовании и производстве электронной техники [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.В. Кручинин, Ю.Н. Тановицкий, С.Л. Хомич. - Томск: ТУ-СУР, 2012. - 155 с. - Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208586
4.	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
5.	Манякин, М.Д. Программный пакет Wien2K. Часть 2. Моделирование рентгеновских эмиссионных и абсорбционных спектров: учебно-методическое пособие / М.Д. Манякин, О.И. Дубровский, Е.Р. Лихачев, С.И. Курганский // Воронежский государственный университет. - Воронеж. - 2017- 31 с. – URL : http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m17-154.pdf
6.	Федотова, Е.Л. Информационные технологии в науке и образовании/ Е.Л.Федотова, А.А.Федотов: учеб.пособие. – М.: ИД «ФОРУМ»: ИНФРА-М, 2012. – 336 с
7.	Поршнев, С. В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB [Текст] : .— Москва : Лань, 2011 .— 736 с. // Электронно-библиотечная система. — URL : http://e.lanbook.com
8.	Мельников, В. П. Информационные технологии :учебник для вузов / В. П. Мельников.-2-е изд., сте-реотип.- М.:Академия,2009.-424 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
9.	Майстренко, А.В. Информационные технологии в науке, образовании и инженерной практике [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.В. Майстренко, Н.В. Майстренко. - Тамбов: ТГТУ, 2014. - 97 с. - Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=277993
10.	Онокой, Л.С. Компьютерные технологии в науке и образовании: Учебное пособие / Л.С. Онокой, В.М. Титов. - М.: ИД ФОРУМ: ИНФРА-М, 2011. - 224 с.: - Режим доступа: http://znanium.com/catalog/product/241862
11.	Дегтяренко Н.Н. Описание программных пакетов для квантовых расчетов наносистем / Н.Н. Дегтяренко. – М.: МИФИ, 2008. – 180 с.
12.	Основы моделирования в пакете MATLAB : учебное пособие для вузов / Воронеж. гос. ун-т ; сост.: Ю.К. Николаенков, В.И. Ключин, Е.Н. Боромотов. — Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2015 .— 56 с. Режим доступа http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m15-151.pdf
13.	Моделирование задач радиофизики и электроники в системе MATHCAD : Учебное пособие / Ю.С. Радченко, А.Д. Коробова ; Воронеж. гос. ун-т .— Воронеж, 2004 .— 47 с. Режим доступа http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/jun04003.pdf
14.	Электронная структура конденсированных сред / Качнельсон А.А. [и др.]. - М.: Изд-во МГУ, 1990. – 237 с.
15.	Соловьев М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. - М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2005. – 536 с.
16.	Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. / Дж. Слэтер. – М.: Мир, 1978. – 658 с.
17.	Гурский, Ю. Компьютерная графика: Photoshop CS2, CorelDraw X3, Illustrator CS2 / Ю. Гурский, И. Гурская, А. Жвалевский. СПб.: Питер, 2006. – 986 с
18.	Дорошенко, Ю.А. Компьютерные технологии в научных исследованиях: методические указания по самостоятельной работе / Ю.А. Дорошенко. - Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2015. - 34 с.
19.	Земсков, А.И. Электронная информация и электронные ресурсы: публикации и документы, фонды и библиотеки. Москва: ФАИР,

	2007.
20.	Силаенков, А.Н. Информационное обеспечение и компьютерные технологии в научной и образовательной деятельности [Электронный ресурс]: учебное пособие / Силаенков А.Н. - Омск: Омский государственный институт сервиса, 2014. - 115 с. - Режим доступа: http://www.iprbookshop.ru/26682 .

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

№ п/п	Ресурс
21.	http://www.lib.vsu.ru – Зональная научная библиотека ВГУ
22.	http://www.moodle.vsu.ru
23.	https://lanbook.com – ЭБС «Лань»
24.	https://biblioclub.ru – ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
25.	www.znanium.com – ЭБС «Znanium.com»

26.	https://edu.vsu.ru □ Образовательный портал "Электронный университет ВГУ"
27.	www.iprbookshop.ru – ЭБС «IPRbooks»
28.	https://elibrary.ru – Научная электронная библиотека

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1.	Манякин, М.Д. Программный пакет Wien2K . Часть 1. Моделирование электронной структуры кри-сталлов. 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
2.	Манякин, М.Д. Программный пакет Wien2K . Часть 2. Моделирование рентеновских эмиссионных и абсорбционных спектров: учебно-методическое пособие / М.Д. Манякин, О.И. Дубровский, Е.Р. Лихачев, С.И. Курганский // Воронежский государственный университет. – Воронеж. – 2017- 31 с. – URL : http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m17-154.pdf
3.	Курганский, С.И. Методы зонной теории. Часть 1. Методические указания по курсу «Вычислительные методы в теории твердого тела» / С.И. Курганский, Н.С. Переславцева, О.И. Дубровский. – Воронежский государственный университет. – Воронеж. – 2006. – 20 с. – URL : http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/sep06011.pdf
4.	Основы моделирования в пакете MATLAB : учебное пособие для вузов] / Воронеж. гос. ун-т ; сост.: Ю.К. Николаенков, В.И. Ключин, Е.Н. Борمونтов. — Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2015. — 56 с. Режим доступа http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m15-151.pdf
5.	Моделирование задач радиофизики и электроники в системе MATHCAD : Учебное пособие / Ю.С. Радченко, А.Д. Коробова ; Воронеж. гос. ун-т. — Воронеж, 2004. — 47 с. Режим доступа http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/jun04003.pdf

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

При реализации дисциплины используются активные и интерактивные методы и технологии профессионального обучения.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Лекционные занятия и аудитория для самостоятельной работы - лаборатория компьютерных технологий, САПР и математического моделирования (к.19) Компьютеры Pentium Intel Core Duo - 8 шт, Microsoft Windows 7, договор 3010-15/207-19 от 30.04.2019; Wien2k, рег. № лицензии W2k-3039; Gaussian 09 Rev D.01 S/N FA7355682010; GaussView S/N FA7139344060, QuartusII version 9.1 Лицензия Build 304 01/25/2010 Web Edition

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

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	ОПК-3	ИД-1ОПК-3 ИД-2ОПК-3	Лаб. работы 1, 2
2.	Компьютерные технологии в научной деятельности	ОПК-4	ИД-1ОПК-4 ИД-2ОПК-4 ИД-3ОПК-4	Лаб. работы 3 – 7

3.	Подготовка и представление результатов научных исследований	ОПК-3	ИД-1ОПК-3 ИД-2ОПК-3	Лаб. работы 8, 9
----	---	-------	------------------------	------------------

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
Промежуточная аттестация форма контроля - экзамен				Комплект КИМ

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

Текущий контроль успеваемости

1) тестовые задания:

...

1. МИНКРИСТ – это

- а) электронно-библиотечная система
- б) сайт научного журнала по структурной химии
- в) наименование издательства
- г) кристаллографическая база данных

2. eLibrary.Ru – это

- а) российская научная электронная библиотека
- б) электронно-библиотечная система
- в) библиографическая база данных научных публикаций российских учёных и индекс цитирования научных статей.
- г) научная библиотека МГУ

3. Вычислительный эксперимент в физике – это

- а) исследование физических проблем средствами вычислительной математики
- б) подключение компьютера для обработки физического эксперимента
- в) автоматизированное управление физическим экспериментом
- г) исследование устойчивости вычислительной задачи

4. Какая арифметическая операция может привести к катастрофической потере точности?

- а) сложение двух близких чисел одного знака
- б) вычитание двух близких чисел одного знака
- в) умножение двух близких чисел одного знака
- г) деление двух близких чисел одного знака

5. Вычислительная задача называется корректной, если (Укажите все ответы)

- а) её решение может быть реализовано с помощью компьютера
- б) для её решения не требуется применение численных методов
- в) её решение устойчиво по отношению к малым возмущениям входных данных
- г) её решение единственно

6. Каков порядок точности метода Эйлера, используемого при решении задачи о теплообмене ?

- а) 0
- б) 1
- в) 2
- г) 0,1

7. В каком случае алгоритм решения задачи Коши с помощью метода Эйлера с большой долей вероятности может оказаться неустойчивым? (Укажите все ответы)

- а) если ожидается экспоненциально спадающее решение
- б) если ожидается экспоненциально нарастающее решение
- в) если ожидается линейно нарастающее решение

г) если ожидается быстро осциллирующее решение

8. Какова электронная конфигурация атома хлора? (Атом хлора имеет 17 электронов)

- а) $1s^2 2p^6 3d^9$ б) $1s^2 2p^8 3d^7$ в) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ г) $1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^4 3d^3$

9. Ячейкой Вигнера-Зейтца с центром в некотором узле решетки называется:

- а) сфера атомного радиуса с центром в данном узле
б) область пространства, лежащая ближе к этому узлу, чем к какому-либо другому
в) сфера радиусом, равным половине атомного радиуса, с центром в данном узле
г) сфера радиусом, равным двум атомным радиусам, с центром в данном узле

10. Какие функции используются в качестве базисных в методе плоских волн?

- а) б) в) г)

11. Сколько типов трёхмерных решеток Браве вам известно?

- а) 5 б) 7 в) 12 г) 14

2) расчетные задачи:

12. Дайте краткую характеристику этапов вычислительного эксперимента.

13. Перечислите причины, которыми обусловлено наличие погрешности в решении, получаемом с помощью вычислительного эксперимента?

14. Приведите пример численно неустойчивой вычислительной задачи.

15. Сформулируйте требования, предъявляемые к вычислительным алгоритмам.

16. Составьте модель процесса остывания нагретой жидкости с помощью метода Эйлера численного решения задачи Коши.

17. Составьте входной файл для расчета электронной плотности и кулоновского потенциала нейтрального атома с помощью программного комплекса CrystAll.

18. Составить входной файл для расчета электронной плотности и кулоновского потенциала кристалла с помощью программного комплекса CrystAll.

19. Составить входной файл для расчета электронной зонной структуры кристалла с помощью программного комплекса CrystAll.

20. Опишите идею метода псевдопотенциала расчета зонной структуры.

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 выполнения лабораторных работ	Повышенный уровень	Отлично
Обучающийся владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), допускает незначительные ошибки при выполнении лабораторных работ	Базовый уровень	Хорошо
Обучающийся владеет частично теоретическими основами дисциплины, фрагментарно способен выполнять лабораторные задания	Пороговый уровень	Удовлетворительно

Неудовлетворительные ответы на вопросы. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки при выполнении лабораторных работ	–	Неудовлетворительно
---	---	---------------------

Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Комплект КИМ

Контрольно-измерительный материал № 1

1. Офисные технологии в профессиональной деятельности.
2. Возможности программного комплекса Quantum Espresso и его структура.

Контрольно-измерительный материал № 2

1. Средства для создания презентаций.
2. Основные возможности пакета Wien2k и его интерфейс.

Контрольно-измерительный материал № 3

1. Применение интернет-технологий в профессиональной деятельности.
2. Подготовка исходных данных для моделирования электронной структуры и свойств кристаллических структур в Wien2k. Использование программы визуализации XCrysden.

Контрольно-измерительный материал № 4

1. Основы работы с программой Abinit. Основные возможности программы.
2. Роль информационных технологий в организации научной деятельности.

Контрольно-измерительный материал № 5

1. Математические пакеты в обработке результатов научного эксперимента.
2. Подготовка исходных данных для расчета электронной структуры в Quantum Espresso.

Контрольно-измерительный материал № 6

1. Создание входных файлов для моделирования строения и свойств кристаллических структур в Abinit.
2. Инструменты визуализации в научной работе.

Контрольно-измерительный материал № 7

1. Моделирование макроскопических свойств кристаллов в Abinit.
2. Методы поиска научной информации в Интернет.

Контрольно-измерительный материал № 8

1. Понятие и классификация компьютерных информационных технологий.
2. Применение программного пакета MatLab для научных и инженерных расчетов.

Контрольно-измерительный материал № 9

1. Основные пути повышения эффективности научных исследований за счет использования современных компьютерных технологий..
2. Обзор математических пакетов, используемых в научных исследованиях: MathCad, Mathematica, Maple, MatLab.

Описание технологии проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине — экзамен. В приложение к диплому вносится оценка **отлично/хорошо/удовлетворительно**.

Оценка уровня освоения дисциплины «Компьютерные технологии в научных исследованиях» осуществляется по следующим показателям:

- качество и своевременность выполнения лабораторных работ;
- полнота ответов на вопросы контрольно-измерительного материала;
- полнота ответов на дополнительные вопросы.

Критерии оценки освоения дисциплины «Компьютерные технологии в научных исследованиях»:

— оценка **отлично** выставляется при полном соответствии работы студента всем вышеуказанным показателям. Соответствует высокому (углубленному) уровню сформированности компетенций: компетенции сформированы полностью, проявляются и используются систематически, в полном объеме. Данный уровень превосходит, по крайней мере, по одному из перечисленных выше показателей повышенный (продвинутый) уровень;

— оценка **хорошо** выставляется в случае, если работа студента при освоении дисциплины не соответствует одному из перечисленных показателей или в случае предоставления курсовых работ и отчетов по лабораторным работам позже установленного срока. Соответствует повышенному (продвинутому) уровню сформированности компетенций: компетенции в целом сформированы, но проявляются и используются фрагментарно, не в полном объеме. Данный уровень

превосходит, по крайней мере, по одному из перечисленных выше показателей пороговый (базовый) уровень;

— оценка удовлетворительно выставляется в случае, если работа студента при освоении дисциплины не соответствует любым двум из перечисленных показателей. Соответствует пороговому (базовому) уровню сформированности компетенций: компетенции сформированы в общих чертах, проявляются и используются ситуативно, частично. Данный уровень обязателен для всех осваивающих основную образовательную программу;

— оценка неудовлетворительно выставляется в случае несоответствия работы студента всем показателям, его неорганизованности, безответственности и низкого качества работы при выполнении лабораторных работ, предусмотренных программой дисциплины.

Факт невыполнения требований, предъявляемых к студенту при освоении дисциплины «Компьютерные технологии в научных исследованиях» и отраженных в вышеперечисленных критериях, фиксируется в ведомости оценкой **неудовлетворительно**.

Если студент не осваивает дисциплину в установленном программой объеме и в сроки, определенные графиком учебного процесса, он не допускается к промежуточной аттестации по данному виду учебной работы.

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЙ

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Направление: 11.04.04 Электроника и нанoeлектроника

_____ шифр и наименование направления/специальности

Дисциплина: Б1.О.09 Компьютерные технологии в научных исследованиях
_____ код и наименование дисциплины

Профиль подготовки: Интегральная электроника и нанoeлектроника
_____ в соответствии с Учебным планом

Форма обучения: _____ очная

Учебный год: 2023-2024

Ответственный исполнитель -

<u>Зав.кафедрой ФТТиНС</u> должность, подразделение	_____	<u>(Э.П. Домашевская)</u> расшифровка подписи	31.08.2023
--	-------	--	------------

Исполнители:

<u>Доцент каф. ФТТиНС</u> должность, подразделение	_____	<u>(О.И. Дубровский)</u> расшифровка подписи	31.08.2023
_____	_____	_____	__ . __ 20__
_____	_____	_____	_____

СОГЛАСОВАНО:

Куратор ООП ВО направления 11.04.04	_____	<u>(Г.В. Быкадорова)</u> расшифровка подписи	31.08.2023
--	-------	---	------------

Зав.отделом обслуживания ЗНБ	_____	<u>(Н.В. Белодедова)</u> расшифровка подписи	31.08.2023
---------------------------------	-------	---	------------

Рекомендована _____ НМС физического факультета, протокол № 5 от 25.05.2023
(наименование факультета, структурного подразделения)