

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ  
Директор по образовательной  
деятельности

\_\_\_\_\_ С.Т. Князев  
«\_\_» \_\_\_\_\_

### РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

<b>Код модуля</b>	<b>Модуль</b>
1159300	Методы математического моделирования

**Екатеринбург**

<b>Перечень сведений о рабочей программе модуля</b>	<b>Учетные данные</b>
<b>Образовательная программа</b> 1. Материалы микро- и наносистемной техники	<b>Код ОП</b> 1. 28.04.01/33.01
<b>Направление подготовки</b> 1. Нанотехнологии и микросистемная техника	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 1. 28.04.01

Программа модуля составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Чернышев Владимир Артурович	кандидат физико- математических наук, доцент	Доцент	физики конденсированного состояния и наноразмерных систем

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

# 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Методы математического моделирования

## 1.1. Аннотация содержания модуля

В модуль входит курс «Моделирование кристаллов и наноструктур». Рассматривается моделирование кристаллических структур и наноразмерных систем. Рассматриваются основы ab initio расчетов, их возможности для описания свойств наноматериалов. Рассматриваются математические аспекты, интерпретация полученных результатов. Проводится ознакомление и приобретаются навыки работы с современными программами для ab initio расчетов, с программами для визуализации результатов.

## 1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Моделирование кристаллов и наноструктур	4
ИТОГО по модулю:		4

## 1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	Не предусмотрены
Постреквизиты и кореквизиты модуля	Не предусмотрены

## 1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Моделирование кристаллов и наноструктур	ОПК-2 - Способен самостоятельно ставить, формализовывать и решать задачи, относящиеся к профессиональной деятельности, используя методы моделирования и математического анализа	З-1 - Сделать обзор основных методов моделирования и математического анализа, применимых для формализации и решения задач профессиональной деятельности З-2 - Характеризовать сферы применения и возможности пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности

		<p>У-1 - Самостоятельно сформулировать задачу области профессиональной деятельности, решение которой требует использования методов моделирования и математического анализа</p> <p>У-2 - Использовать методы моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности</p> <p>П-1 - Решать самостоятельно сформулированные практические задачи, относящиеся к профессиональной деятельности методами моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ</p> <p>Д-1 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p>
	<p>ОПК-3 - Способен планировать и проводить комплексные исследования и изыскания для решения инженерных задач относящихся к профессиональной деятельности, включая проведение измерений, планирование и постановку экспериментов, интерпретацию полученных результатов</p>	<p>З-2 - Характеризовать возможности исследовательской аппаратуры и методов исследования, используя технические характеристики и области применения</p> <p>З-3 - Сделать обзор основных методов статистической обработки и анализа результатов измерений</p> <p>У-1 - Собирать и анализировать научно-техническую информацию для оптимального планирования исследования и изыскания</p> <p>У-2 - Обоснованно выбрать необходимую аппаратуру и метод исследования для решения инженерных задач, относящихся к профессиональной деятельности</p> <p>П-1 - Выполнять в рамках поставленного задания экспериментальные комплексные научно-технические исследования и изыскания для решения инженерных задач в области профессиональной деятельности, включая обработку, интерпретацию и оформление результатов</p> <p>Д-1 - Проявлять умение видеть детали, упорство, аналитические умения</p>

	<p>ПК-3 - Способен разрабатывать физические и математические модели, проводить компьютерное моделирование исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и микросистемной техники</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание взаимосвязи между структурой и свойствами материалов, определять общие принципы построения моделей исследуемых процессов, явлений и объектов исходя из фундаментальных теорий</p> <p>У-1 - Применять теоретические знания и алгоритмы для решения задач, составлять математические модели при исследовании физических процессов</p> <p>П-1 - Производить иллюстрированные расчеты, выполнять разработку моделей путем сравнения с физическим явлением, экспериментальными или теоретическими данными</p>
--	--	---

### 1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Моделирование кристаллов и наноструктур**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Чернышев Владимир Артурович	кандидат физико- математических наук, доцент	Доцент	физики конденсированног о состояния и наноразмерных систем

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики**

Протокол № 3 от 17.03.2022 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Чернышев Владимир Артурович, Доцент, физики конденсированного состояния и наноразмерных систем

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
  - Базовый уровень

*\*Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

*Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.*

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Моделирование ab initio «из первых принципов»	Моделирование свойств кристаллов, основанное только на их химическом составе. Предсказание структуры и свойств из решения уравнений квантовой механики.  Концепция самосогласованного поля. Основы вычислительных методов в квантовой химии. Уравнения Хартри и их прямые уточнения. Уравнения Хартри — Фока. Теория функционала электронной плотности. Метод Кона-Шэма. Орбитали Кона-Шэма. Обменно-корреляционный функционал. «Иерархия» функционалов – LDA, GGA, и гибридные функционалы. Базисные наборы.
P2	Ab initio расчет зонной структуры и определение ширины запрещенной зоны	Основные предположения зонной теории. Волновая функция электрона в периодическом поле. Зоны Бриллюэна.  Методы и модели расчета энергетической структуры кристаллов. Расчет зонной структуры методом Хартри-Фока, а также в рамках теории функционала электронной плотности (DFT). Выбор функционала. Оптимизация базисных наборов.  Расчеты зонной структуры соединений, содержащих подрешетку d- или f- элементов.

<b>P3</b>	Ab initio расчет кристаллической структуры, фононного спектра, упругих постоянных	Расчет кристаллической структуры, фононного спектра, упругих свойств соединений в рамках теории функционала плотности. Псевдопотенциалы. Использование псевдопотенциалов при моделировании структуры и динамики решетки. Использование псевдопотенциалов при моделировании кристаллов, содержащих подрешетку d- или f-элементов. Визуализация результатов. Программы Jmol, VESTA и другие.
<b>P4</b>	Моделирование кристаллической структуры широкозонных диэлектриков, активированных редкоземельными ионами. Расчет электронной структуры редкоземельных примесных центров и нанокластеров	Моделирование кристаллической структуры одиночных примесных центров и наноразмерных кластеров, образуемых редкоземельными ионами в кристаллах. Учет искажения кристаллической решетки вблизи примеси. Расчет параметров кристаллического поля. Расчет оптического спектра редкоземельного иона с учетом J-J смешивания.
<b>P5</b>	Моделирование новых материалов	Моделирование тонких пленок, нанокластеров, фуллеренов в рамках ab initio подхода. Моделирование влияния давления.

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Моделирование кристаллов и наноструктур

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Крашенинин, В. И.; Квантовая химия : учебное пособие.; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2019; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=600391> (Электронное издание)

#### Печатные издания

- Исакова, О. П., Тарасевич, Ю. Ю., Юзюк, Ю. И.; Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin : [учеб.-метод. пособие].; ЛИБРОКОМ, Москва; 2009 (2 экз.)
- Минкин, В. И.; Теория строения молекул : Учеб. пособие для вузов.; Феникс, Ростов н/Д; 1997 (1 экз.)
- Цирельсон, В. Г.; Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие.; БИНОМ. Лаборатория знаний, Москва; 2014 (4 экз.)

#### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

- Institute of Physics (IOP). <http://iopscience.iop.org/>
- Университетская библиотека онлайн: <http://biblioclub.ru>
- Зональная научная библиотека УрФУ: <http://lib.urfu.ru>



4. Сайт программы CRYSTAL. Режим доступа: <https://www.crystal.unito.it>

### Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

### Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1. Российская государственная библиотека. <http://www.rsl.ru>
2. Государственная публичная научно-техническая библиотека России. <http://www.gpntb.ru>

## 3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Моделирование кристаллов и наноструктур

### Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Подключение к сети Интернет	OriginPro Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES CRYSTAL17
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	OriginPro Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES CRYSTAL17
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в	OriginPro

		<p>соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p>	<p>Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM</p> <p>Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> <p>CRYSTAL17</p>
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p>	<p>OriginPro</p> <p>Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM</p> <p>Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> <p>CRYSTAL17</p>
5	Самостоятельная работа студентов	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>OriginPro</p> <p>Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM</p> <p>Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> <p>CRYSTAL17</p>