


Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 05.09.2022 08:23:19  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП



 И.А. Каплунов

«28» июня 2022 г.

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

Моделирование твердотельных систем

Направление подготовки

03.04.03 Радиофизика

Направленность (профиль)

Физика и технология материалов и устройств радиоэлектроники

Для студентов

2 курса, очной формы обучения

Составитель: д.ф.-м.н., профессор Самсонов В.М.



Тверь, 2022

## **I. Аннотация**

### **1. Цель и задачи дисциплины**

Целью освоения дисциплины является знакомство с современными методами компьютерного моделирования, включая первопринципное и атомистическое моделирование, прежде всего, методы Монте-Карло и молекулярной динамики, овладение базовыми навыками реализации указанных методов применительно к исследованию кристаллических и аморфных твердых тел, в также твердых наночастиц и твердотельных наносистем.

Задачами освоения дисциплины являются:

- знакомство с основами методов моделирования и разновидностями моделирования, отвечающими различным уровнем имитации исследуемой системы: уровню электронной структуры, атомистическому уровню, континуальному уровню;
- изучение основ методов статистического и детерминистического моделирования (Монте-Карло и молекулярная динамика);
- знакомство с программами, предназначенными для моделирования наносистем и выполнение заданий, связанных с использованием этих программ.
- Освоение некоторых программ для обработки результатов атомистического моделирования.

### **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Дисциплина Моделирование твердотельных систем относится к Блоку 1. дисциплин обязательной части учебного плана.

Методы и методология моделирования, включая компьютерное моделирование, все шире используются в науке и технике, в том числе в гуманитарных науках. В рамках данного спецкурса рассматриваются базовые понятия теории моделирования (оригинал, модель, упрощенная модель, гомоморфная модель и др.). Эти понятия изучаются на серьезном научном уровне в кибернетике, т.е. науке об управлении в сложных системах. Изучение этих

вопросов имеет большое значение для формирования у студентов методологии современного научного исследования, а также для формирования у них научного мировоззрения. Помимо базовых понятий и концепций излагаются основы двух, наиболее широко применяющихся подходов к моделированию атомно-молекулярных систем – атомистического и первопринципного моделирования, а также двух основных методов атомистического моделирования: методов Монте-Карло и молекулярной динамики.

Данный курс тесно связан с разделами «Квантовая механика», «Термодинамика и статистическая физика» курса теоретической физики, а также с рядом спецкурсов, связанных с физикой конденсированного состояния вещества и кристаллографией.

Освоение дисциплины будет востребовано при выполнении научно-исследовательской работы и прохождении ознакомительной и преддипломной практики.

Для успешного освоения курса достаточно знаний и навыков, сформированных в бакалавриате при изучении курсов общей и теоретической физики. Будет также предусмотрена возможность успешного освоения курса лицами с техническим образованием.

**3. Объем дисциплины:** 4 зачетных единицы, 144 академических часа, в том числе:

**контактная аудиторная работа:** лекции 26 часов;

**самостоятельная работа:** 118 час, в том числе контроль 27 часов.

**4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

<i>Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)</i>	<i>Планируемые результаты обучения по дисциплине</i>
УК-2.Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	УК-2.2. Разрабатывает концепцию проекта в рамках обозначенной проблемы: формулирует цель, задачи, обосновывает актуальность,

	<p>значимость, ожидаемые результаты и возможные сферы их применения;</p> <p>УК-2.4. Осуществляет мониторинг хода реализации проекта, корректирует отклонения, вносит дополнительные изменения в план реализации проекта, уточняет зоны ответственности участников проекта.</p>
<p>ОПК-1. Способен применять фундаментальные знания в области физики и радиофизики для решения научно-исследовательских задач, в том числе в сфере педагогической деятельности</p>	<p>ОПК-1.1. Формулирует самостоятельно научно-исследовательскую задачу и планирует этапы ее выполнения, опираясь на фундаментальные знания в области физики и радиофизики;</p> <p>ОПК-1.2. Выполняет постановку эксперимента и/или построение алгоритма для моделирования физических процессов в рамках реализации научно-исследовательских задач</p>
<p>ОПК-3. Способен применять современные информационные технологии, использовать компьютерные сети и программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.</p>	<p>ОПК-3.2. Применяет современные программные продукты для анализа и обработки результатов научной деятельности.</p>

## **5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения**

Экзамен в 3 семестре.

**6. Язык преподавания:** русский.