

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Физический факультет

Утверждено

решением Ученого совета ННГУ
протокол от «31» мая 2023 г. № 6

Рабочая программа дисциплины

**Математическое моделирование
физических процессов**

Уровень высшего образования
бакалавриат

Направление подготовки / специальность
09.03.02 Информационные системы и технологии

Направленность образовательной программы
Информационные системы и технологии в физических исследованиях

Форма обучения
очная

Год начала подготовки

2022 год

Нижний Новгород

2023 год

1. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Математическое моделирование физических процессов» (Б1.В.ДВ.04.02) относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, Блока 1 «Дисциплины (модули)» учебного плана основной образовательной программы, является курсом по выбору.

Дисциплина преподается в 3 семестре.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	
ПК-14. Способен обосновывать правильность выбранной модели, сопоставляя результаты экспериментальных данных и полученных решений в области применения информационных технологий в физических исследованиях и смежных областях	ПК-14.1. Знать основные методы обработки и сравнения результатов экспериментальных данных и полученных решений.	<i>Знать</i> основные свойства физических моделей, терминологию, взаимосвязь модели и физических законов, с помощью которых она описывается.	<i>Собеседование</i>
	ПК-14.2. Уметь обосновывать правильность выбранной модели.	<i>Уметь</i> применять методы моделирования, тестирования результатов.	<i>Практическая задача</i>
	ПК-14.3. Владеть опытом выбора и обоснования правильности выбранной модели, сопоставления результатов экспериментальных данных и полученных решений.	<i>Владеть</i> методами молекулярной динамики и методами Монте-Карло для реализации разрабатываемых моделей.	<i>Практическая задача</i>
ПК-16. Способен к выполнению работ по проектированию, отладке, проверке работоспособности и модификации программного обеспечения информационных систем	ПК-16.1. Знать методы разработки программного обеспечения и технологии программирования.	<i>Знать</i> основные методы вычислительной математики, применяемые при разработке программного обеспечения и в технологии программирования.	<i>Собеседование</i>
	ПК-16.2. Владеть навыками проектирования, отладки программного обеспечения и проверки работоспособности.	<i>Владеть</i> методологией научного исследования, иметь навыки экспериментального, теоретического и модельного изучения различных явлений и процессов.	<i>Практическая задача</i>
ПКО-6. Способен разрабатывать и применять системное и прикладное алгоритмическое	ПКО-6.1. Знать основные типы существующего программного обеспечения и методы их разработки	<i>Знать</i> основные методы разработки программного обеспечения	<i>Собеседование</i>
	ПКО-6.2. Уметь	<i>Уметь</i> применять методы	<i>Практическая</i>

программное обеспечение в различных областях применения информационных систем и технологий	разрабатывать прикладные программы для задач обработки информации	разработки прикладного программного обеспечения	<i>задача</i>
	ПКО-6.3. Владеть опытом выбора и обоснования правильности применения программного обеспечения	<i>Владеть</i> навыками алгоритмизации для создания прикладного и системного ПО	<i>Практическая задача</i>

3. Структура и содержание дисциплины

3.1. Трудоемкость дисциплины

Очная форма обучения	
Общая трудоемкость	6 ЗЕТ
Часов по учебному плану	216
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	66
- занятия лекционного типа, ч	32
- практические занятия, ч	32
- лабораторных, ч	-
самостоятельная работа, ч	114
контроль, ч	36
Промежуточная аттестация	экзамен

3.2. Содержание дисциплины

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),	Всего (часы)	В том числе				Самостоятельная работа, часы
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы				
		из них				
		Занятия лекционного типа	Практические занятия	Занятия лабораторного типа	Всего	
1. Введение	3	1			1	2
2. Метод молекулярной динамики. <u>Сдача отчета по первой задаче</u>	95	15	14 2		31	64
3. Методы Монте-Карло. <u>Сдача отчета по второй задаче</u>	96	16	14 2		32	64
Промежуточная аттестация: экзамен	22				2	20

Содержание разделов дисциплины:

1. Введение.

Цели и задачи курса. Основная и дополнительная литература. Краткая история физического моделирования. Компьютерный эксперимент – третье направление в физике, промежуточное между экспериментальными и теоретическими исследованиями. Достоинства и недостатки компьютерного эксперимента.

2. Метод молекулярной динамики

2.1. Общая характеристика метода молекулярной динамики.

Энергия взаимодействия системы из N частиц. Уравнения движения частиц на основе классической механики Ньютона. Начальные условия. Особенности численного решения уравнений движения. Алгоритм Верле. Проблема выбора шага по времени. Различные граничные условия: периодические, случайные, свободные, жесткие.

2.2. Потенциалы межатомного взаимодействия (ПМВ).

Понятие эмпирического ПМВ. Двухчастичные и трехчастичные ПМВ. Потенциал твердых шаров. Потенциал Борна-Майера. Потенциал Морзе. Потенциал Леннарда-Джонса. Потенциал Вуксевича. Трехчастичный потенциал Стиллинджера-Вебера для ковалентных полупроводников. Потенциал Терсоффа.

2.3. Применение метода молекулярной динамики к исследованию газов и жидкостей.

Усреднение по пространству и усреднение по времени. Эргодичность. Определение характеристик микроканонического ансамбля частиц. Переход к равновесию и процедура получения средних значений. Определение температуры. Определение давления. Получение распределения Максвелла для идеального газа. Получение уравнения состояния неидеального газа. Определение коэффициента самодиффузии. Молекулярная динамика канонического ансамбля. Перенормировка скоростей. Канонический ансамбль при постоянном давлении.

2.4. Метод молекулярной динамики для твердых тел.

Основные задачи моделирования. Особенности моделирования кристаллов с кубическими решетками. Особенности граничных условий в кристаллах. Моделирование образования вакансии в алмазной решетке. Расчет ее конфигурационных и энергетических характеристик. Моделирование других дефектов: вакансионных комплексов, собственных и примесных междоузельных атомов. Моделирование аморфного состояния. Функция радиального распределения.

3. Методы Монте-Карло.

3.1. Общая характеристика методов Монте-Карло (ММК)

Сравнение детерминистических и стохастических методов. Марковский процесс. Стационарность. Эргодичность. Оценка погрешности ММК.

3.2. Генераторы случайных чисел (ГСЧ).

Линейный конгруэнтный генератор. Тестирование ГСЧ на период, на коррелированность, на равномерность, на короткие корреляции. Построение улучшенного ГСЧ.

3.3. Применение ММК к исследованию случайных блужданий.

Одномерные случайные блуждания. Двумерные и трехмерные случайные блуждания. Диффузия частиц в модели решеточного газа. Другие виды случайных блужданий и их применение для исследования физических систем (рассеяние частиц на неподвижных центрах, движение экситонов и т.д.).

3.4. ММК для моделирования системы частиц

Получение средних значений наблюдаемых величин. Идея предпочтительной выборки. Алгоритм Метрополиса. Микроканонический ансамбль частиц. Демон. Канонический ансамбль. Модель Изинга для магнетиков. Определение критической температуры, теплоемкости, намагниченности. Критическое замедление. Модель Изинга для бинарного сплава. Получение фазовых диаграмм.

3.5. Моделирование роста кристаллических пленок.

Классическая модель зародышеобразования. Кристаллизация на реальной поверхности. Роль дефектов. Модель Косселя-Странского. Алгоритм моделирования. Совершенствование модели (диффузия атомов по поверхности, рост за счет движения ступеней и т.д.).

3.6. Моделирование ионной имплантации.

Основные положения теории Линдхарда-Шарффа-Шютта. Модель твердых шаров. Получение гистограммы распределения внедренных шаров. Расчет среднепроецированного пробега. Сравнение с экспериментальными значениями.

Текущий контроль успеваемости реализуется в рамках занятий в компьютерном классе.

Промежуточная аттестация проходит в традиционной форме - экзамен.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

4.1. Самостоятельная внеаудиторная работа студентов осуществляется в следующих формах:

1. Работа с лекциями, основной и дополнительной литературой, другими источниками, найденными в поисковых системах Интернета. Такая работа необходима для сдачи допуска по индивидуальным практическим заданиям и для подготовки к экзаменам.

2. Использование профессиональных прикладных программ для разработки модели, составления собственной программы расчетов на одном из алгоритмических языков высокого уровня, её предварительного тестирования с помощью одной из программ аналитических вычислений, визуализации и тестирования результатов расчетов, составления итогового отчета по задаче в форме отчета по НИР.

3. Предполагается, что каждый студент имеет дома персональный компьютер с выходом в Интернет и набор необходимых прикладных программ.

4. Работа со средствами телекоммуникации, в том числе электронной почтой, телеконференциями, Интернетом и т.д.

5. Использование электронных библиотек, распределенных и централизованных издательских систем.

6. Написание итогового отчета по задаче в форме отчета по НИР.

Контрольные вопросы и задания для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведены в п. 5.2.1.

4.2. Порядок выполнения и контроля самостоятельной работы

1. Получение индивидуальных практических заданий, вопросов для сдачи допусков.

2. Подготовка к индивидуальным собеседованиям с преподавателем по полученным вопросам.

3. Контроль – сдача допуска.

4. Разработка алгоритма и составление программы на алгоритмическом языке высокого уровня.
Контроль – демонстрация работы программы в компьютерном классе.

5. Тестирование программы, выполнение пунктов заданий.

6. Контроль – сдача задачи в электронном виде.
7. Написание отчета по задаче.
8. Контроль – сданный отчет в распечатанном на бумаге виде.
9. Пункты 1-5 выполняются поочередно, сначала для задачи по разделу «Метод молекулярной динамики», затем по разделу «Методы Монте-Карло».

4.3. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы

Практические задания для студентов и методические рекомендации по их выполнению изложены в методическом пособии: Васин А.С. Компьютерный эксперимент в физике. Методические указания и задания. Н. Новгород: ННГУ, 2006. 44 с.

4.4. Темы индивидуальных практических заданий

Темы заданий приведены в п. 5.2.2. настоящей программы.

4.5. Некоторые типовые вопросы для сдачи допуска.

1. Сформулировать цель работы.
2. Какие физические процессы изучаются в Вашей задаче?
3. Написать и объяснить формулы потенциалов межатомного взаимодействия, применяемые в Вашей задаче.
4. Написать и объяснить дифференциальные уравнения движения частиц.
5. Объяснить алгоритм решения системы полученных дифференциальных уравнений.
6. Какие начальные и граничные условия используются в Вашей задаче?
7. Как проверить выполнение законов сохранения энергии, импульса?
8. Как выбирается шаг по времени при интегрировании уравнений движения?
9. Как генерируются случайные числа в задачах по методам Монте-Карло?
10. Объяснить алгоритм Метрополиса для Вашей задачи.
11. Привести примеры тестирования правильности работы программы.
12. Привести структурную схему программы моделирования изучаемого процесса (явления).
13. Нарисовать примерный интерфейс программы.
14. В каком виде Вы будете представлять графический и иллюстративный материал по результатам расчетов?

5. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю),

включающий:

5.1. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	Шкала оценивания сформированности компетенций						
	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	Не зачтено		зачтено				

<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок.	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки.	Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельным и несущественным недочетом, выполнены все задания в полном объеме.	Продемонстрированы все основные умения, Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие навыков вследствие	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.	Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.	Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач.

	е отказа обучающ егося от ответа	место грубые ошибки.	и				
--	----------------------------------	----------------------	---	--	--	--	--

Шкала оценки при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	Превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно»
	Отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «отлично»
	Очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «очень хорошо»
	Хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «хорошо»
	Удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	Неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно», ни одна из компетенций не сформирована на уровне «плохо»
	Плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

5.2.1 Контрольные вопросы для подготовки к экзамену

№	Вопросы	Код формируемой компетенции
1	Компьютерный эксперимент в физике. Его достоинства и недостатки.	ПК-14.1, ПК-14.2
2	Общая характеристика метода молекулярной динамики. Выбор потенциала взаимодействия и формы расчетной ячейки.	ПК-14.1, ПК-14.2

3	Математическая постановка задачи в ММД.	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
4	Алгоритм Верле решения задачи Коши в ММД.	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3
5	Проблема выбора шага по времени и граничных условий в ММД.	ПК-14.1, ПК-14.2
6	Центральные эмпирические потенциалы межатомного взаимодействия.	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
7	Нецентральные эмпирические потенциалы межатомного взаимодействия	ПК-14.1, ПК-14.2
8	Усреднение по пространству и усреднение по времени в ММД для системы частиц.	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
9	Определение характеристик микроканонического ансамбля частиц в ММД.	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
10	Получение уравнения состояния неидеального газа и определение коэффициента самодиффузии в системе частиц ММД.	ПК-14.1, ПК-14.2
11	Молекулярная динамика канонического ансамбля. Канонический ансамбль при постоянном давлении.	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3
12	Моделирование точечных дефектов в кристаллах методом МД. Общие положения. Выбор граничных условий.	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
13	Моделирование образования вакансии в алмазной решетке.	ПК-14.1, ПК-14.2
14	Моделирование образования междоузельного атома в кубических решетках.	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3
15	Моделирование примесных атомов в кристаллах.	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
16	Моделирование аморфного состояния твердого тела. Функция радиального распределения.	ПК-14.1, ПК-14.2
17	Общая характеристика метода Монте-Карло. Марковские процессы.	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3
18	Погрешность метода Монте-Карло.	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3
19	Генераторы случайных чисел. Линейный конгруэнтный генератор.	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
20	Проверка генераторов случайных чисел.	ПК-14.1, ПК-14.2
21	Применение ММК к исследованию случайных блужданий.	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3
22	Случайные блуждания частицы решеточного газа: связь с диффузией.	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
23	ММК для моделирования системы частиц. Идея	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3

	предпочтительной выборки.	
24	Алгоритм Метрополиса в ММК.	ПК-14.1, ПК-14.2
25	Микроканонический ансамбль частиц в ММК. «Демон».	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
26	Канонический ансамбль частиц в ММК.	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3
27	Модель Изинга ферромагнетика. Фазовый переход порядок-беспорядок.	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
28	Критическое замедление в модели Изинга.	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3
29	Модель Изинга бинарного сплава. Общая характеристика. Начальная конфигурация. Периодические граничные условия .	ПК-14.1, ПК-14.2
30	Модель Изинга бинарного сплава. Фазовая диаграмма. Теплоемкость. Фазовый переход 2-ого рода.	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3
31	Общая характеристика моделирования роста кристаллов. Теория зародышеобразования.	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
32	Особенности роста реальных кристаллов.	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3
33	Модель роста кристалла Косселя.	ПК-14.1, ПК-14.2
34	Совершенствование модели роста кристалла Косселя	ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
35	Модель ионной имплантации (модель твердых шаров).	ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3

5.2.2. Темы индивидуальных практических заданий

По каждому разделу курса студент выполняет одну задачу (каждый свою из приведенного ниже списка). Требуется разработать модель, провести физическую и математическую постановку задачи, написать программу в одной из систем программирования, выполнить тестирование задачи, написать и сдать отчет по проделанной работе.

	Темы	Компетенции
По разделу «Метод молекулярной динамики»		
1	Моделирование аргоноподобного двумерного газа частиц с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
	Моделирование испарения двумерной капли жидкости.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
3	Исследование распределения по скоростям молекул двумерного идеального газа.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
4	Исследование температурной зависимости внутренней энергии двумерной системы частиц в каноническом ансамбле.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1,

		ПКО-6.2, ПКО-6.3
5	Получение уравнения состояния идеального двумерного газа.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
6	Исследование простых свойств переноса системы частиц.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
7	Исследование поведения двумерной системы частиц при охлаждении.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
8	Исследование аморфизованного состояния двумерной системы частиц с помощью функции радиального распределения.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
9	Определение энергии образования вакансии в кремниевом кристаллите при межатомном потенциале взаимодействия Вуксевича.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
10	Определение энергии образования вакансии в кремниевом кристаллите при межатомном потенциале взаимодействия Стиллинджера-Вебера	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
По разделу «Методы Монте-Карло»		
11	Проверка генератора случайных чисел.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
12	Одномерные случайные блуждания.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
13	Случайные блуждания частиц на двумерной решетке.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
14	Исследование двумерного распределения частиц при диффузии с поверхности. Метод случайных блужданий	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
15	Модель Изинга на квадратной решетке для ферромагнетика с переворотом спина в каноническом ансамбле.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
16	Модель Изинга для магнетика на квадратной решетке с динамикой Кавасаки.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
17	Модель Изинга для бинарного сплава на квадратной решетке в каноническом ансамбле.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
18	Модель Изинга для бинарного сплава с ПК решеткой в каноническом ансамбле.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1,

		ПКО-6.2, ПКО-6.3
19	Моделирование роста грани простого кубического кристалла.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-16.1, ПК-16.2, ПК-16.3, ПКО-6.1, ПКО-6.2, ПКО-6.3
20	Моделирование ионной имплантации.	ПК-14.1, ПК-14.2

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Васин А.С. Компьютерный эксперимент в физике. Методические указания и задания.. Н. Новгород: ННГУ, 2006. 44 с.
2. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Том II. Термодинамика и молекулярная физика. М: Наука, издания разных лет.
3. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. Н. Новгород: ННГУ, издания 1985, 1993, 2000 гг.
4. Васин А.С. Моделирование роста грани простого кубического кристалла. Практикум. Н. Новгород: ННГУ, 2014. 18 с.
5. Васин А.С. Применение численных методов к моделированию физических процессов: Практикум». – 2-е изд исправ. и доп. - Н. Новгород: ННГУ, 2021. – 44 с.

б) дополнительная литература:

1. Моделирование роста и легирования полупроводниковых пленок методом Монте-Карло. Новосибирск: Наука, 1991.
2. Х. Гулд, Я. Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. Т. 1. М.: Мир, 1990.
3. Х. Гулд, Я. Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. Т. 2. М.: Мир, 1990.
4. Д. Поттер. Вычислительные методы в физике. М.: Мир, 1975.
5. Зализняк В.Е. Основы вычислительной физики. Часть 2. Введение в методы частиц. Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»; Институт компьютерных исследований, 2006. 156 с.
6. Д. Хеерман. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990.
7. Методы Монте-Карло в статистической физике. Под ред. К. Биндера. М.: Мир, 1982.
8. К. Жаблон, Ж.-К. Симон. Применение ЭВМ для численного моделирования в физике. М.: Наука, 1983.
9. С. Кунин. Вычислительная физика. М.: Мир, 1992.
10. Моделирование ионной имплантации в кремниевой технологии. Описание лабораторной работы. Сост. Васин А.С., Акинкина Е.И. Н. Новгород: ННГУ, 1995.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Пакеты Borland Delphi, Microsoft Visual C++ , установленные в компьютерном классе.

2. Пакет компьютерных аналитических и графических вычислений для персонального компьютера. Допускается применение сред Wolfram Mathematica, Matlab, MathCAD, Maple или любых иных компьютерных ресурсов аналогичного назначения.

3. Интернет-ресурс справочной и математической литературы со свободным доступом

[http://www. eqworld.ipmnet.ru](http://www.eqworld.ipmnet.ru)

Литература, изданная в ННГУ, имеется в библиотеке ННГУ в расчете на каждого студента. Остальная литература имеется в библиотеке в нескольких экземплярах. Нужные главы, параграфы могут быть скопированы, отсканированы, получены в свободном доступе из Интернета. Журнальные статьи имеются в открытом доступе в сети Интернет.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

По курсу имеется необходимое количество учебников и учебных пособий в библиотеке факультета и университета. Некоторые из них представлены на сайте физического факультета ННГУ и в форме Интернет-ресурсов в электронном виде.

Практические занятия проводятся в компьютерном классе, имеющем 12 достаточно современных компьютеров с установленным лицензионным программным обеспечением.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО ННГУ с учетом рекомендаций и ООП ВПО по направлению подготовки 09.03.02 «Информационные системы и технологии».

Автор:

к.ф.-м.н., доцент кафедры ИТФИ _____ Васин А.С.

Рецензент

д.ф.-м.н., профессор, зав. каф.
статистической радиофизики и
мобильных систем связи РФФ

Мальцев А.А.

Заведующий кафедрой ИТФИ
д.т.н., профессор

Фидельман В.Р

Программа одобрена на заседании методической комиссии физического факультета ННГУ.

Председатель УМК физ.ф-та _____ Перов А.А.