

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 № 10 от 02.12.2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Компьютерные технологии в физике конденсированного состояния

Уровень высшего образования
Бакалавриат

Направление подготовки / специальность
03.03.02 - Физика

Направленность образовательной программы
Физика конденсированного состояния

Форма обучения
очная

г. Нижний Новгород

2025 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.1.ДВ.02 Компьютерные технологии в физике конденсированного состояния относится к части, формируемой участниками образовательных отношений образовательной программы.

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	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
ПК-3: Способен проводить научные исследования с помощью современной приборной базы, сложного физического оборудования и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта	ИД ПК-3: Демонстрация способности проводить научные исследования с помощью современной приборной базы, сложного физического оборудования и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта	ИД ПК-3: Знать современные компьютерные технологии в физике конденсированного состояния. Уметь применять компьютерные технологии для решения задач физики конденсированного состояния. Владеть навыками использования современных компьютерных технологий для численного решения задач физики конденсированного состояния.	Задания	Зачёт с оценкой: Контрольные вопросы

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	3
Часов по учебному плану	108
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	24
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	48
- КСР	1
самостоятельная работа	35

Промежуточная аттестация	0 Зачёт с оценкой
---------------------------------	------------------------------------

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/лабораторные работы), часы	Всего	
0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0	
1. Компьютерные технологии решения классических уравнений движения.	12	2	4	6	6
2. Методы молекулярной динамики.	25	6	12	18	7
3. Компьютерные технологии для решения дифференциальных уравнений в частных производных.	19	4	8	12	7
4. Компьютерные технологии для решения стационарного уравнения Шредингера.	16	4	8	12	4
5. Компьютерные технологии для решения нестационарного уравнения Шредингера.	13	2	4	6	7
6. Модели спинового магнетизма и их численный анализ.	22	6	12	18	4
Аттестация	0				
КСР	1			1	
Итого	108	24	48	73	35

Содержание разделов и тем дисциплины

1. Компьютерные технологии решения классических уравнений движения.

Методы Эйлера. Методы Рунге-Кутты. Алгоритм Верле. Выбора шага по времени.

2. Методы молекулярной динамики.

Потенциалы взаимодействия. Решение задачи классической динамики многих частиц. Граничные условия. Термостатирование. Применение программных пакетов для моделирования молекулярной динамики.

3. Компьютерные технологии для решения дифференциальных уравнений в частных производных.

Конечно-разностные методы решения уравнений теплопроводности, переноса, волнового уравнения. Метод Крэнка-Николсона. Численное решение уравнения Пуассона. Быстрое преобразование Фурье.

4. Компьютерные технологии для решения стационарного уравнения Шредингера.

Конечно-разностные методы решения стационарного уравнения Шредингера. Методы разложения по базису. Базис плоских волн. Базис атомных функций.

5. Компьютерные технологии для решения нестационарного уравнения Шредингера. Методы решения с сохранением нормы волновой функции. Схема Кэли. Динамика волновых пакетов. Динамика многоуровневых систем. Квантовая релаксация.

6. Модели спинового магнетизма и их численный анализ. Модели Изинга и Гайзенберга. Цепочки и решетки спинов. Динамика спиновых систем. Численные методы для анализа фазовых переходов в цепочках и решетках спинов.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

Самостоятельная работа обучающихся предполагает изучение конспектов лекций, выделенных разделов основной литературы, а также дополнительной литературы, выполнение практических заданий, отвечающих изучаемым разделам дисциплины, подготовку к промежуточной аттестации.

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Задания) для оценки сформированности компетенции ПК-3:

1. Численное решение стационарного уравнения Шредингера для электрона в кристалле со структурой алмаза.
2. Численная динамика одномерного волнового пакета.
3. Численный анализ модели Изинга на двумерной сетке спинов.

Критерии оценивания (оценочное средство - Задания)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	обучающийся успешно показал умения и навыки выполнения заданий базового уровня сложности
не зачтено	обучающийся не показал минимально допустимый уровень умений и навыков выполнения заданий

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения 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 и. Ошибок нет.	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 отдельными несущественными недочетами, 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 базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	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

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше

		предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «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».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-3

1. Методы Эйлера.
2. Методы Рунге-Кутты.
3. Ненаправленные потенциалы межчастичного взаимодействия.

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	обучающийся продемонстрировал уровень знаний в объеме, превышающем стандартную программу подготовки, и продемонстрировал творческий подход к выполнению практических заданий повышенного уровня сложности
отлично	обучающийся продемонстрировал связное изложение всех теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения практических заданий повышенного уровня сложности
очень хорошо	обучающийся продемонстрировал связное изложение практически всех теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения стандартных практических заданий
хорошо	обучающийся продемонстрировал связное изложение основных теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения стандартных практических заданий
удовлетворительно	обучающийся продемонстрировал изложение формулировок основных

Оценка	Критерии оценивания
	теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения практических заданий базового уровня сложности
неудовлетворительно	обучающийся не продемонстрировал представления об основных теоретических разделах курса, не показал минимально допустимый уровень умений и навыков выполнения практических заданий
плохо	обучающийся не продемонстрировал никаких знаний об основных теоретических разделах курса, не показал никаких умений и навыков выполнения практических заданий

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Физика твердого тела. Электронные свойства твердых тел : Учебное пособие / Сибирский федеральный университет. - Красноярск : Сибирский федеральный университет, 2022. - 256 с. - ВО - Бакалавриат. - ISBN 978-5-7638-4653-9., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=876077&idb=0>.
2. Квазичастицы в физике конденсированного состояния / Брандт Н.Б., Кульбачинский В.А. - Москва : Физматлит, 2007., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=634760&idb=0>.
3. Пейсахович Ю. Г. Физика конденсированного состояния. Фазовые переходы. Магнетики. Свойства диэлектриков : учеб. пособие / Пейсахович Ю. Г., Филимонова Н. И. - Новосибирск : НГТУ, 2018. - 163 с. - Утверждено Редакционно-издательским советом университета в качестве учебного пособия. - Библиогр.: доступна в карточке книги, на сайте ЭБС Лань. - Книга из коллекции НГТУ - Физика. - ISBN 978-5-7782-3612-7., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=720937&idb=0>.
4. Нанокристаллические материалы / Гусев А.И., Ремпель А.А. - Москва : Физматлит, 2000., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=645525&idb=0>.

Дополнительная литература:

1. Мотт Невилл Фрэнсис. Электронные процессы в некристаллических веществах : [в 2 т.]. Т. 1 / пер. с англ. под ред. Б. Т. Коломийца. - 2-е перераб. и доп. изд. - М. : Мир, 1982. - 368 с. : ил. - 2.90., 4 экз.
2. Мотт Невилл Фрэнсис. Электронные процессы в некристаллических веществах : [в 2 т.]. Т. 2 / пер. с англ. под ред. Б. Т. Коломийца. - 2-е перераб. и доп. изд. - М. : Мир, 1982. - 294 с. : ил. - 2.60., 5 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

Интернет-ресурсы Фундаментальной библиотеки ННГУ <http://www.lib.unn.ru/>.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки/специальности 03.03.02 - Физика.

Автор(ы): Конаков Антон Алексеевич, кандидат физико-математических наук.

Заведующий кафедрой: Конаков Антон Алексеевич, кандидат физико-математических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 30.11.2024, протокол № б/н.