

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 30 ноября 2022 г. №13)

Рабочая программа дисциплины
Математическое моделирование
физических процессов

Уровень высшего образования
магистратура

Направление подготовки / специальность
09.04.02 Информационные системы и технологии

Направленность образовательной программы
Информационные системы в научных исследованиях

Форма обучения
очная

Год начала подготовки

2023 год

Нижний Новгород

2022 год

Лист актуализации

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК _____ Перов А.А.
_____ 202_ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для
исполнения в 202_- 202_ учебном году на заседании кафедры

____ Информационных технологий в физических исследованиях _____

Протокол _____ 202_ г. № ____
Зав. кафедрой _____ Фидельман В.Р.

Председатель МК _____
_____ 202_ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для
исполнения в 202_-202_ учебном году на заседании кафедры

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ Фидельман В.Р.

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК _____
_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для
исполнения в 202_-202_ учебном году на заседании кафедры

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК _____
_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для
исполнения в 202_-202_ учебном году на заседании кафедры

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____

1. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Математическое моделирование физических процессов» (Б1.В.ДВ.01.01) относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, Блока 1 «Дисциплины (модули)» учебного плана основной образовательной программы.

Данная дисциплина преподается на заключительном этапе обучения. Поэтому для ее освоения требуются базовые знания большинства ранее изученных естественнонаучных дисциплин математического и физического циклов. Кроме того, требуется общая компьютерная грамотность, знания в области программирования и численных методов

Дисциплина преподается в 1 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-12. Способен осуществлять выбор оптимальных решений, моделирование процессов и объектов профессиональной деятельности при проведении научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ	ПК-12.1. Знает: способы выбора и методы математического моделирования процессов	<i>Знать</i> – метод молекулярной динамики для моделирования системы взаимодействующих частиц; – методы Монте-Карло для моделирования атомных систем; – основные модели для изучения газов, жидкостей, аморфных и кристаллических твердых тел, магнетиков, полупроводниковых соединений и сплавов; – некоторые модели, имитирующие технологические процессы микроэлектроники (ионная имплантация, рост кристаллов и т.д.).	Собеседование
	ПК-12.2. Умеет: применять методы цифровой обработки данных при решении традиционных задачах в области информационных технологий	<i>Уметь</i> разрабатывать модели несложных физических процессов, включая этапы постановки задачи, составления программы, тестирования и анализа результатов моделирования.	Практическая задача
	ПК-12.3. Владеет: навыками применения математических моделей и объектов профессиональной деятельности при	<i>Владеть</i> одной из современных систем разработки компьютерных программ (в среде Visual C++, пакете Mathematica), одной из систем обработки и визуализации результатов научных экспериментов	Практическая задача

	проведении научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ		
ПК-13. Способен понимать и применять в научно-исследовательской и прикладной деятельности современный математический аппарат, основные законы естествознания, современные языки программирования, программное обеспечение, операционные системы, сетевые технологии	ПК-13.1. Знает: современный математический аппарат, основные законы естествознания, современные языки программирования и программное обеспечение.	<i>Знать</i> высшую математику, основные законы атомной физики, физики твердого тела, программирование на уровне пакета Mathematica и(или) Visual C++, в совершенстве одну из операционных систем	Собеседование
	ПК-13.2. Умеет: проводить разработку алгоритмического и программного обеспечения в области информационных технологий в научных исследованиях.	<i>Уметь</i> составлять программы на алгоритмическом языке высокого уровня для исследований в области информационных технологий, цифровой обработки сигналов, моделирования физических процессов в системе многих частиц	Практическая задача
	ПК-13.3. Имеет: практический опыт владения существующими методами и алгоритмами решения задач цифровой обработки сигналов, опыт работы с научными источниками.	<i>Владеть</i> методами поиска современной научно-технической информации - научных статей, алгоритмов, открытых программ, методических материалов, в совершенстве пользоваться поисковыми системами Интернета	Практическая задача

3. Структура и содержание дисциплины

3.1. Трудоемкость дисциплины

Очная форма обучения	
Общая трудоемкость	7 ЗЕТ
Часов по учебному плану	252
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	66
- занятия лекционного типа, ч	16
- практические занятия, ч	48
- КСРИФ, ч	2
контроль	54
самостоятельная работа, ч	132
Промежуточная аттестация	экзамен

3.2. Содержание дисциплины

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),	Всего (часы)	В том числе Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них				Самостоятельная работа, часы
		Занятия лекционного типа	Практические занятия в т/к	Занятия лабораторного типа	Всего	
1. Введение	3	1	-	-	1	2
2. Метод молекулярной динамики. <u>Сдача отчета по первой задаче</u>	105	7	20 4	-	31	60 14
3. Методы Монте-Карло. <u>Сдача отчета по второй задаче</u>	106	8	20 4	-	32	60 14
2Промежуточная аттестация: экзамен	2	-	-	-	2	-
<u>Итого</u>	216	16	48	-	66	150

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-Шиотта. 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 по выполненным задачам

Промежуточная аттестация проходит в форме экзамена.

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.

Контроль – сдача допуска.

3. Разработка алгоритма и составление программы на алгоритмическом языке высокого уровня.

Контроль – демонстрация работы программы в компьютерном классе.

4. Тестирование программы, выполнение пунктов заданий.

Контроль – сдача задачи в электронном виде.

5. Написание отчета по задаче.

Контроль – сданный отчет в распечатанном на бумаге виде.

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: Практикум. – 2-е изд. исправл. и доп. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2022. 60 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 незначительных 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.	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными незначительными недочетами, выполнены все задания в полном объеме.	Продemonстрированы 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 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	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач.

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-12.1, ПК-13.1
2	Общая характеристика метода молекулярной динамики. Выбор потенциала взаимодействия и формы расчетной ячейки.	ПК-12.1, ПК-13.1
3	Математическая постановка задачи в ММД.	ПК-12.1, ПК-13.1
4	Алгоритм Верле решения задачи Коши в ММД.	ПК-12.1, ПК-13.1

5	Проблема выбора шага по времени и граничных условий в ММД.	ПК-12.1, ПК-13.1
6	Центральные эмпирические потенциалы межатомного взаимодействия.	ПК-12.1, ПК-13.1
7	Нецентральные эмпирические потенциалы межатомного взаимодействия	ПК-12.1, ПК-13.1
8	Усреднение по пространству и усреднение по времени в ММД для системы частиц.	ПК-12.1, ПК-13.1
9	Определение характеристик микроканонического ансамбля частиц в ММД.	ПК-12.1, ПК-13.1
10	Получение уравнения состояния неидеального газа и определение коэффициента самодиффузии в системе частиц ММД.	ПК-12.1, ПК-13.1
11	Молекулярная динамика канонического ансамбля. Канонический ансамбль при постоянном давлении.	ПК-12.1, ПК-13.1
12	Моделирование точечных дефектов в кристаллах методом МД. Общие положения. Выбор граничных условий.	ПК-12.1, ПК-13.1
13	Моделирование образования вакансии в алмазной решетке.	ПК-12.1, ПК-13.1
14	Моделирование образования междоузельного атома в кубических решетках.	ПК-12.1, ПК-13.1
15	Моделирование примесных атомов в кристаллах.	ПК-12.1, ПК-13.1
16	Моделирование аморфного состояния твердого тела. Функция радиального распределения.	ПК-12.1, ПК-13.1
17	Общая характеристика метода Монте-Карло. Марковские процессы.	ПК-12.1, ПК-13.1
18	Погрешность метода Монте-Карло.	ПК-12.1, ПК-13.1
19	Генераторы случайных чисел. Линейный конгруэнтный генератор.	ПК-12.1, ПК-13.1
20	Проверка генераторов случайных чисел.	ПК-12.1, ПК-13.1
21	Применение ММК к исследованию случайных блужданий.	ПК-12.1, ПК-13.1
22	Случайные блуждания частицы решеточного газа: связь с диффузией.	ПК-12.1, ПК-13.1
23	ММК для моделирования системы частиц. Идея предпочтительной выборки.	ПК-12.1, ПК-13.1
24	Алгоритм Метрополиса в ММК.	ПК-12.1, ПК-13.1
25	Микроканонический ансамбль частиц в ММК. «Демон».	ПК-12.1, ПК-13.1
26	Канонический ансамбль частиц в ММК.	ПК-12.1, ПК-13.1
27	Модель Изинга ферромагнетика. Фазовый переход порядок-беспорядок.	ПК-12.1, ПК-13.1
28	Критическое замедление в модели Изинга.	ПК-12.1, ПК-13.1
29	Модель Изинга бинарного сплава. Общая характеристика. Начальная конфигурация. Периодические граничные	ПК-12.1, ПК-13.1

	условия .	
30	Модель Изинга бинарного сплава. Фазовая диаграмма. Теплоемкость. Фазовый переход 2-ого рода.	ПК-12.1, ПК-13.1
31	Общая характеристика моделирования роста кристаллов. Теория зародышеобразования.	ПК-12.1, ПК-13.1
32	Особенности роста реальных кристаллов.	ПК-12.1, ПК-13.1
33	Модель роста кристалла Косселя.	ПК-12.1, ПК-13.1
34	Совершенствование модели роста кристалла Косселя	ПК-12.1, ПК-13.1
35	Модель ионной имплантации (модель твердых шаров).	ПК-12.1, ПК-13.1

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-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
	Моделирование испарения двумерной капли жидкости.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
3	Исследование распределения по скоростям молекул двумерного идеального газа.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
4	Исследование температурной зависимости внутренней энергии двумерной системы частиц в каноническом ансамбле.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
5	Получение уравнения состояния идеального двумерного газа.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
6	Исследование простых свойств переноса системы частиц.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
7	Исследование поведения двумерной системы частиц при охлаждении.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
8	Исследование аморфизованного состояния двумерной системы частиц с помощью функции радиального распределения.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
9	Моделирование фазового перехода 1-го рода в двумерной системе частиц	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
10	Определение энергии образования вакансии в кремниевом кристаллите при межатомном потенциале взаимодействия Вуксевича.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
11	Определение энергии образования вакансии в кремниевом	ПК-12.2, ПК-13.2,

	кристаллите при межатомном потенциале взаимодействия Стиллинджера-Вебера	ПК-12.3, ПК-13.3
12	Определение энергии образования собственного междоузельного атома в кремниевом кристаллите при межатомном потенциале взаимодействия Терсоффа	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
По разделу «Методы Монте-Карло»		
13	Проверка генератора случайных чисел.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
14	Одномерные случайные блуждания.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
15	Случайные блуждания частиц на двумерной решетке.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
16	Исследование двумерного распределения частиц при диффузии с поверхности. Метод случайных блужданий	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
17	Моделирование диффузии нейтронов через пластинку	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
18	Двумерный ядерный реактор	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
19	Модель Изинга на квадратной решетке для ферромагнетика с переворотом спина в каноническом ансамбле.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
20	Модель Изинга для магнетика на квадратной решетке с динамикой Кавасаки.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
21	Модель Изинга для бинарного сплава на квадратной решетке в каноническом ансамбле.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
22	Модель Изинга для бинарного сплава с ПК решеткой в каноническом ансамбле.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
23	Моделирование роста грани простого кубического кристалла.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3
24	Моделирование ионной имплантации.	ПК-12.2, ПК-13.2, ПК-12.3, ПК-13.3

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Васин А.С. Компьютерный эксперимент в физике: Практикум. – 2-е изд. исправл. и доп. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2022. 60 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. исправл. и доп. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2021. 44 с.

б) дополнительная литература:

1. Моделирование роста и легирования полупроводниковых пленок методом Монте-Карло. – Новосибирск: Наука, 1991.
2. Гулд Х, Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т. 1. – М.: Мир, 1990.
3. Гулд Х, Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т. 2. – М.: Мир, 1990.
4. Поттер Д. 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. Хеерман Д. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990.
7. Методы Монте-Карло в статистической физике. Под ред. К. Биндера. М.: Мир, 1982.
8. Жаблон К., Симон Ж.-К. Применение ЭВМ для численного моделирования в физике. – М.: Наука, 1983.
9. Кунин С. 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.
11. Васин А.С. Моделирование роста грани простого кубического кристалла: Практикум. – Н. Новгород: ННГУ, 2014. – 18 с.

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 ОПОП ВПО по направлению подготовки 09.04.02 «Информационные системы и технологии».

Автор:

к.ф.-м.н., доцент кафедры ИТФИ

Васин А.С.

Заведующий кафедрой ИТФИ

д.т.н., профессор

Фидельман В.Р

Программа одобрена на заседании методической комиссии физического факультета ННГУ
17 ноября 2022 года, протокол б/н.

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