Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский государственный технический университет»

Кафедра материаловедения в машиностроении

“УТВЕРЖДАЮ”
ДЕКАН МТФ
к.т.н. Тюрин А. Г.

**ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ПРОСТОЙ НЕКВАЛИФИЦИРОВАННОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ**
**31.08.2026**
**Владелец: к.т.н. Тюрин А. Г.**
**Срок действия: не ограничен**
**Адрес хранения электронного документа:**
**https://www.nstu.ru/university/info/sveden/education**

# РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
# Математическое и компьютерное моделирование материалов и процессов

Образовательная программа: 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов, магистерская программа: Исследование материалов с применением синхротронных, нейтронных и электронных методов

Курс: 1, семестр : 2

Механико-технологический факультет,

| | | **Семестр** |
|---|---|---|
| **№** | **Вид деятельности** | **2** |
| **1** | Всего зачетных единиц (кредитов) | 3 |
| **2** | Всего часов | 108 |
| **3** | Всего занятий в контактной форме, час. | 43 |
| **4** | Лекции, час. | 0 |
| **5** | Практические занятия, час. | 34 |
| **6** | Лабораторные занятия, час. | 0 |
| **7** | из них в активной и интерактивной форме, час. | 0 |
| **8** | из них практической подготовки, час. | 34 |
| **9** | Аттестация, час. | 2 |
| **10** | Консультации, час. | 7 |
| **11** | Самостоятельная работа, час. | 65 |
| **12** | Виды самостоятельной работы (курсовой проект, курсовая работа, РГЗ(Р)/реферат, подготовка к контрольной работе) | |
| **13** | Вид аттестации | 3 |

Новосибирск 2026

Рабочая программа составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению (специальности): 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов

ФГОС введен в действие приказом №306 от 24.04.2018 г. , дата утверждения: 15.05.2018 г.

Место дисциплины в структуре учебного плана: Блок 1, обязательная

Рабочая программа разработана на основе компетентностной модели выпускника по направлению (специальности): 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры

ММ, 31.08.2026

Утверждена на совете механико-технологического факультета, протокол № 8 от 31.08.2026

Заведующий кафедрой:

доцент, д.т.н. Никулина А. А.

Ответственный за образовательную программу:

профессор Батаев И. А.

## 1. Внешние требования

Таблица 1.1

| Группа | Компетенции |
|---|---|
| | **Индикаторы достижения компетенций** |
| Общепрофессиональные компетенции | ОПК-1 Способен решать производственные и (или) исследовательские задачи, на основе фундаментальных знаний в области материаловедения и технологии материалов |
| | ОПК-1. 2 Использует современные методы моделирования для прогнозирования структуры и свойств материалов и (или) анализа технологических процессов производства и обработки материалов |
| Профессиональные компетенции | ПК-7/НА Способен выбирать и применять современные методы исследования и прогнозирования структуры и свойств материалов при решении профессиональных задач (в том числе для исследования структуры и свойств наноматериалов), анализировать результаты исследований, оформлять полученные результаты в виде отчётов и научных статей |
| | ПК-7/НА. 3 Умеет использовать современные методы вычислительного материаловедения для прогнозирования структуры и свойств материалов |

## 2. Требования НГТУ к планируемым результатам обучения, соотнесенным с индикаторами достижения компетенций

Таблица 2.1

| Индикаторы достижения компетенций | Формы организации занятий |
|---|---|
| **Результаты обучения** | |
| **ОПК-1. 2 Использует современные методы моделирования для прогнозирования структуры и свойств материалов и (или) анализа технологических процессов производства и обработки материалов** | |
| Использовать методы квантово-химического моделирования для оценки поведения материалов в условиях внешних термических и механических воздействий | Практические занятия; Самостоятельная работа |
| Принципы квантово-химических рассчетов | Практические занятия; Самостоятельная работа |
| **ПК-7/НА. 3 Умеет использовать современные методы вычислительного материаловедения для прогнозирования структуры и свойств материалов** | |
| Использовать методы квантово-химического моделирования для теоретической оценки структуры свойств простых веществ и соединений | Практические занятия; |

## 3. Содержание и структура дисциплины

Таблица 3.1

| Темы практических занятий | Часы | Из них в форме практ. подг., час. | Активные формы, час. | Индикаторы достижения компетенций | Учебная деятельность |
|---|---|---|---|---|---|
| **Семестр: 2** | | | | | |
| **Дидактическая единица: Основы квантово-химического моделирования** | | | | | |
| 1. Построение кристаллических структур простых веществ и соединений с использованием среды Atomic Simulation Environment. | 4 | 4 | 0 | ОПК-1.2,ПК-7/НА.3 | Выполнение практических работ в компьютерном классе |
| 2. Расчеты с использованием теории эффективной среды | 4 | 4 | 0 | ОПК-1.2,ПК-7/НА.3 | Выполнение практических работ в компьютерном классе |

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 3. Основы проведения расчетов с использованием теории функционала плотности | 4 | 4 | 0 | ОПК-1.2,ПК-7/НА.3 | Выполнение практических работ в комптютернм классе |
| 4. Энергетические расчеты методом присоединенных плоских волн | 2 | 2 | 0 | ОПК-1.2,ПК-7/НА.3 | Выполнение практичесих работ в компьютерном классе |
| 5. Расчеты электронной структуры кристаллических веществ | 4 | 4 | 0 | ОПК-1.2,ПК-7/НА.3 | Выполнение практических работ в компьютерном классе |
| 6. Определение упругих свойств твердых тел | 2 | 2 | 0 | ОПК-1.2,ПК-7/НА.3 | Выполнение практических работ в компьютерном классе |
| **Дидактическая единица: Ab initio молекулярная динамика и термодинамика** | | | | | |
| 7. Моделирование диффузионных процессов с использованием метода подталкивания упругой ленты | 4 | 4 | 0 | ОПК-1.2 | Выполнение практических работ в компьютерном классе |
| 8. Фононные расчеты | 6 | 6 | 0 | ОПК-1.2 | Выполнение практических работ в компьютерном классе |
| 9. Термодинамические расчеты | 4 | 4 | 0 | ОПК-1.2 | Выполнение практических работ в компьютерном классе |

| Темы для самостоятельного изучения | Часы | Из них в форме практ. подг., час. | Активные формы, час. | Индикаторы достижения компетенций | Учебная деятельность |
|---|---|---|---|---|---|
| **Семестр: 2** | | | | | |
| **Дидактическая единица: Основы квантово-химического моделирования** | | | | | |
| 1. Теория функционала плотности. Уравнения Кон-Шэма | 12 | 0 | 0 | ОПК-1.2 | Самостоятельное изучение теоретического материала |
| 2. Расчеты стабильных состояний кристаллических структур. Атомные силы. | 10 | 0 | 0 | ОПК-1.2 | Самостоятельное изучение теоретического материала |
| 3. Формализм, используемый для расчетов упругих свойств | 10 | 0 | 0 | ОПК-1.2 | Самостоятельное изучение теоретического материала |
| 4. Использование теории функционала плотности для расчетов зонной структуры | 9 | 0 | 0 | ОПК-1.2 | Самостоятельное изучение теоретического материала |
| **Дидактическая единица: Ab initio молекулярная динамика и термодинамика** | | | | | |
| 5. Расчеты собственных мод колебаний и собственных частот | 10 | 0 | 0 | ОПК-1.2 | Самостоятельное изучение теоретического материала |
| 6. Колебания, фононы и их связь с термодинамическими характеристиками материалов | 14 | 0 | 0 | ОПК-1.2 | Самостоятельное изучение теоретического материала |

## 3.1 Практическая подготовка

Таблица 3.2

| № | Темы занятий | Формы организации занятий | Содержание практической подготовки (виды работ) |
|---|---|---|---|

| | | | |
|---|---|---|---|
| 1 | Построение кристаллических структур простых веществ и соединений с использованием среды Atomic Simulation Environment. | Пр | Выполняет следующие виды работ: построение кристаллических структур простых веществ и соединений с использованием среды Atomic Simulation Environment. |
| 2 | Расчеты с использованием теории эффективной среды | Пр | Выполняет следующие виды работ: расчеты с использованием теории эффективной среды |
| 3 | Основы проведения расчетов с использованием теории функционала плотности | Пр | Выполняет следующие виды работ: основы проведения расчетов с использованием теории функционала плотности |
| 4 | Энергетические расчеты методом присоединенных плоских волн | Пр | Выполняет следующие виды работ: энергетические расчеты методом присоединенных плоских волн |
| 5 | Расчеты электронной структуры кристаллических веществ | Пр | Выполняет следующие виды работ: расчеты электронной структуры кристаллических веществ |
| 6 | Определение упругих свойств твердых тел | Пр | Выполняет следующие виды работ: определение упругих свойств твердых тел |
| 7 | Моделирование диффузионных процессов с использованием метода подталкивания упругой ленты | Пр | Выполняет следующие виды работ: моделирование диффузионных процессов с использованием метода подталкивания упругой ленты |
| 8 | Фононные расчеты | Пр | Выполняет следующие виды работ: фононные расчеты |
| 9 | Термодинамические расчеты | Пр | Выполняет следующие виды работ: термодинамические расчеты |

## 3.2 Самостоятельная работа обучающегося

Таблица 3.3

| № | Виды самостоятельной работы | Индикаторы достижения компетенций | Часы на выполнение | Часы на консультации |
|---|---|---|---|---|
| **Семестр: 2** | | | | |
| 1 | Подготовка к занятиям | ОПК-1.2 | 0 | 0 |
| : Алетдинова А. А. Информационные технологии и основы программирования : электронный учебно-методический комплекс / А. А. Алетдинова , В. А. Хворостов ; Новосиб. гос. техн. ун-т.- Новосибирск, [2022].- Текст : электронный.- Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=222431.- Загл. с титул. экрана. | | | | |
| 2 | Подготовка к аттестации | ОПК-1.2 | 0 | 7 |
| : Алетдинова А. А. Информационные технологии и основы программирования : электронный учебно-методический комплекс / А. А. Алетдинова , В. А. Хворостов ; Новосиб. гос. техн. ун-т.- Новосибирск, [2022].- Текст : электронный.- Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=222431.- Загл. с титул. экрана. | | | | |
| 3 | Самостоятельное изучение теоретического материала | ОПК-1.2 | 65 | 0 |
| Студент изучает темы, приведенные в таблице 3.1 : Алетдинова А. А. Информационные технологии и основы программирования : электронный учебно-методический комплекс / А. А. Алетдинова , В. А. Хворостов ; Новосиб. гос. техн. ун-т.- Новосибирск, [2022].- Текст : электронный.- Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=222431.- Загл. с титул. экрана. | | | | |

### 3.3 Технология обучения

Для организации и контроля самостоятельной работы обучающихся, а также проведения консультаций применяются информационно-коммуникационные технологии (табл. 3.4).

Таблица 3.4

| Деятельность | Информационно-коммуникационные технологии |
|---|---|
| Информирование | e-mail |
| Консультирование | e-mail |
| Контроль | e-mail |
| Размещение учебных материалов | e-mail |

## 4. Правила аттестации обучающихся по дисциплине

Для аттестации обучающихся по дисциплине используется балльно-рейтинговая система (БРС), позволяющая выставлять оценки по традиционной шкале и 15-уровневой ECTS. Краткая информация о БРС приведена в табл. 4.1.

Таблица 4.1

| Оцениваемые виды деятельности обучающихся | Мин. балл | Максимальный балл |
|---|---|---|
| **Семестр: 2** | | |
| *Практические занятия:* | 40 | 80 |
| *Зачет:* | 10 | 20 |

В таблице 4.2 представлено соответствие форм контроля заявляемым требованиям к результатам освоения дисциплины.

Таблица 4.2

| Коды компетенций | Индикаторы достижения компетенций | Формы контроля | |
|---|---|---|---|
| | | | Зачет |
| **ОПК-1** | ОПК-1 2. Использует современные методы моделирования для прогнозирования структуры и свойств материалов и (или) анализа технологических процессов производства и обработки материалов | | + |
| **ПК-7/НА** | ПК-7/НА 3. Умеет использовать современные методы вычислительного материаловедения для прогнозирования структуры и свойств материалов | | + |

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в приложении № 1 к рабочей программе.

## 5. Литература

*Основная литература*

**1.** Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. — 3-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 428 с. — ISBN 978-5-8114-3961-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/206195 (дата обращения: 15.01.2024). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

**2.** Филимонова Н. И. Физика конденсированного состояния : учебное пособие / Н. И. Филимонова, Р. П. Дикарева ; Новосиб. гос. техн. ун-т.- Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2016.- 134, [2] с. : ил.- Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000232229

*Дополнительная литература*

**1.** Шаров Ю. И. Техническая термодинамика : [учебное пособие] / Ю. И. Шаров, О. К. Григорьева, А. А. Францева.- Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2020.- 213, [1] с. : ил., табл.- Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000243157

*Интернет-ресурсы*

**1.** ASE. Atomic Simulation Environment : [website]. – URL: https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/index.html# (access date: 15.01.2024).

**2.** GPAW: DFT and beyond within the projector-augmented wave method : [website]. – URL: https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/index.html# (access date: 15.01.2024).

## 6. Методическое и программное обеспечение, информационные технологии

*6.1 Методическое обеспечение*

**1.** Алетдинова А. А. Информационные технологии и основы программирования : электронный учебно-методический комплекс / А. А. Алетдинова , В. А. Хворостов ; Новосиб. гос. техн. ун-т.- Новосибирск, [2022].- Текст : электронный.- Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=222431.- Загл. с титул. экрана.

*6.2 Специализированное программное обеспечение*

**1** Среда разработки JetBrains PyCharm Community Edition

*6.3 Информационные технологии*

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине применяются элементы дистанционных образовательных технологий, а также синхронного и асинхронного взаимодействия в электронной информационно-образовательной среды НГТУ.

## 7. Материально-техническое обеспечение

Лабораторный стенд

| № | Наименование | Назначение |
|---|---|---|
| 1 | Персональный компьютер в комплекте | Проведение занятий |