

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара
Кафедра фізики твердого тіла та оптоелектроніки

“ЗАТВЕРДЖУЮ”
Проректор з науково-педагогічної роботи

_____ Чернецький С.О.

“ ___ ” _____ 2016 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ПП 1.4.05 «Комп’ютерне моделювання у фізиці конденсованого стану»

спеціальність 6.040203– Фізика

факультет фізики, електроніки та комп’ютерних систем

Дніпро – 2016 рік

Робоча програма дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фізиці конденсованого стану» для студентів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 6.040203 – Фізика. – 10 с.

Розробник – Пляка С.М. доцент, к.ф.-м.н., доцент

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри фізики твердого тіла та оптоелектроніки
Протокол від “23” травня 2016 року № 11

Завідувач кафедри фізики твердого тіла та оптоелектроніки

_____ (Трубіцин М.П.)

“23” травня 2016 року

Схвалено науково-методичною комісією за спеціальністю 6.04020302 – Фізика

Протокол від “08” червня 2016 року № 1

Голова НМК _____ (Скалозуб В.В.)

“08” червня 2016 року

Схвалено Вченою радою факультету фізики, електроніки та комп'ютерних систем
Протокол від .06. 2016 року № 67

Голова _____ (Долгов В.М.)

“ _____ ” _____ 2016 року

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 5	Галузь знань 0402 – фізико-математичні науки	нормативна	
Модулів – 1		рік підготовки:	
Змістових модулів – 3		2-й	
		семестр	
Загальна кількість годин – 150	Спеціальність 6.040203 – Фізика	4 -й	
Тижневих годин навчання: аудиторних – 4 самостійної роботи студента – 4,8	Освітньо-кваліфікаційний рівень: бакалавр	лекції	
		17 год.	
		практичні	
		17 год.	
		лабораторні	
		34 год.	
		самостійна робота	
		82 год.	
В тому числі індивідуальні завдання:			
Вид контролю: залік			

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Завдання дисципліни – засвоїти використання сучасної обчислювальної техніки при теоретичному моделюванні фізичних явищ і процесів дає можливість отримання числових результатів в реальному масштабі часу, їх графічне оформлення, представлення результатів в динаміці. Вивчити основні правила побудови фізичних моделей явищ і об'єктів. Основний акцент в програмі ставиться на навчання методів комп'ютерного моделювання і використанню програмних засобів для побудови і аналізу структур систем.

є набуття знань, необхідних для моделювання фізичних процесів, дослідження на сучасному рівні електрофізичних процесів для різних меж між фазами та моделювання явищ і процесів у фізиці твердого тіла.

У результаті вивчення дисципліни студент повинен

- оволодіти чисельними методами;
- пройти підготовку в області сучасних комп'ютерних технологій, які використовуються в науці;
- навчитися моделювати фізичні системи на базі обраних (відомих) або самостійно складених алгоритмів;

- навчитися застосовувати спеціалізовані програмні засоби для побудови фізичного експерименту;
- володіти прийомами відладки та тестування використовуваних моделей;
- отримає навички, необхідні досліднику, працюючому з готовою моделлю.

Підготовлений фахівець повинен *в м і т и* :

- а) використовувати теоретичні знання при вирішенні конкретних задач моделювання та розрахунках фізичних явищ у конденсованих середовищах;
- б) застосовувати базові принципи комп'ютерних технологій та методів при вивченні функціональних напівпровідникових та діелектричних матеріалів.

3. Програма навчальної дисципліни

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 1 Загальні відомості про моделювання

ТЕМА 1.1 Моделювання як метод наукового дослідження. Моделі. Класифікація моделей. Технологія моделювання.

ТЕМА 1.2 Загальні принципи реалізації фізичних моделей..

ТЕМА 1.3 Побудова математичних моделей на основі фундаментальних законів природи. Ієрархія і універсальність математичних моделей

ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ 2 Методи комп'ютерного експерименту в фізиці конденсованих середовищ

ТЕМА 2.1 Метод Монте-Карло. Метод молекулярної динаміки.

ТЕМА 2.2 Теорія перколяції

ТЕМА 2.3

ТЕМА 2.4 Моделювання на основі фізичної теорії подібності і методу аналізу розмірностей

МІСТОВНИЙ МОДУЛЬ 3 Чисельні методи.

ТЕМА 3.1 Чисельні методи

ТЕМА 3.2 Чисельні методи розв'язання систем диференціальних рівнянь

ТЕМА 3.3 Методи побудови та аналізу дискретних моделей Моделювання коливальних процесів

ТЕМА 3.4 Моделювання поширення тепла в стержні

ТЕМА 3.5 Узагальнені криволінійні координати

Методи побудови розрахункових сіток для узагальнених криволінійних координат

ТЕМА 3.6 Поверхневе плавлення та його експериментальне дослідження. Причина плавлення та критерій Лінденмана плавлення кристалів.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього						усього					
		л	п	лаб	інд	с.р.		л	п	лаб	інд	с.р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Модуль 1												
Змістовий модуль 1												
Загальні відомості про моделювання.												
ТЕМА 1.1 Моделювання як метод наукового дослідження. Моделі. Класифікація моделей. технологія моделювання .		2				4						
ТЕМА 1.2 Загальні принципи реалізації фізичних моделей. Складові частини та етапи синтезу математичних моделей .		4				2						
ТЕМА 1.3												
Змістовий модуль 2												
Чисельні методи.												
ТЕМА 2.1 Численні методи .		4		4		5						
ТЕМА 2.2 Чисельні методи розв'язання систем диференціальних рівнянь		3		4		5						
ТЕМА 2.3 Методи побудови та аналізу дискретних моделей Моделювання коливальних процесів		2		2		5						
ТЕМА 2.4 Моделювання поширення тепла в стержні		2		2								
ТЕМА 2.5 Узагальнені криволінійні координати Методи побудови розрахункових сіток для узагальнених криволінійних координат		2				5						
ТЕМА 2.6 Поверхневе плавлення та його експериментальне дослідження. Причина плавлення та критерій Лінденмана плавлення кристалів.		2		3								
Усього годин	108	35		35		38						

5. Теми семінарських занять

Не потребує.

6. Теми практичних занять

Не потребує.

7. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	Моделювання розподілу електростатичного поля точкових зарядів	6
2.	Моделювання росту кристалів методом Чохральського	6
5.	Моделювання кристалевої ґратки кристалів активних діелектриків	2
6.	Модель феромагнетика Ізінга та її моделювання.	4
7.	Моделювання взаємодії N точкових зарядів	3
	разом	35

8. Самостійна робота

1. Основні напрямки застосування комп'ютерів у фізиці.
2. Обчислювальні експерименти та їх роль у сучасній фізиці.
3. Особливості моделювання в середовищі.
4. Основні проблеми фізики поверхні.
5. Сучасні фізичні методи дослідження поверхонь.
6. Умови дифракції від поверхонь.
7. Експериментальні дані про рівноважну структуру поверхонь.
8. Аналіз структури ближнього порядку за допомогою парної функції радіального розподілу атомів.
9. Фізична та хімічна адсорбція.
10. Адсорбційне рівняння Ленгмюра.
11. Адсорбційне рівняння БЕТ для багатошарової адсорбції.
12. Метод Гіббса. Поверхня розділу.
13. Поверхневий натяг та поверхнева енергія.
14. Упорядкування атомної структури поверхні.
15. Реконструкція атомної структури поверхні.
16. Поверхнєве плавлення та його експериментальне дослідження. Причина плавлення та критерій Лінденмана плавлення кристалів.
17. Результати динамічного моделювання малих кристалів щодо поверхневого плавлення.
18. Принципи статистичного аналізу процесів упорядкування. Результат рішення Онзагера для моделі Ізінга. Метод Брега-Вільямса.
19. Квазіхімічний метод й метод Бетте.
20. Проблема пошуку рівноважних станів.
21. Моделювання мікроканонічного ансамбля методом Кройца.. Температура й канонічний ансамбль.
22. Суть алгоритма Метрополіса и алгоритма термостата
23. Моделювання систем с неперервними значеннями ступенів вільності.
24. Періодичні граничні умови.

25. Кінетичне моделювання за методом Монте-Карло.
26. Модель феромагнетика Ізінга та її моделювання. Ймовірності зміни станів атомів у “solid on solid” моделі росту кристала. Практична реалізація методу молекулярної динаміки: основні процедури програм, вибір потенціалу взаємодії частинок, крайові умови і т.п.
27. Перевірка метода: алгоритм Верле й збереження енергії, розподіл молекул за швидкостями, розрахунок тиску за теоремою віріалу сили.
28. Обчислення: парної функція радіального розподілу за результатами моделювання методом молекулярної динаміки.
29. Час життя та дифузія адсорбованих атомів по поверхні. Найпростіша оцінка поверхневої енергії. Анізотропія поверхневої енергії. Сингулярні грані.
30. Зв'язок поверхневої структури та рівноважної форми кристалів. Структура поверхонь та механізми росту кристалів.
31. Основні результати дослідження структури поверхонь методами статистичної фізики. Монте-Карло моделювання росту кристалів; принципіві результати.
32. Моделювання утворення нанокристалічних матеріалів за методом молекулярної динаміки

9. Індивідуальні завдання

Індивідуального завдання 1 (кнр). Варіанти завдань додаються.

10. Методи навчання

Особливістю викладання даної дисципліни є використання як вербальних (лекції), так і практичних методів передачі інформації (семінарські заняття). За характером пізнавальної діяльності використовуємо як пояснювально-ілюстративний метод (лекції), так і методи проблемного навчання під час підготовки до семінарських занять та виконання індивідуальних завдань (модульна робота). Застосовуються сучасні інформаційні технології: Інтернет та внутрішня мережа комп'ютерного класу.

11. Методи контролю

Формою організації навчального процесу є кредитно-модульна система. Для контролю розроблено структуру рейтингової системи оцінювання. Використовуються такі методи поточного контролю як оцінки за опитування та доповіді на семінарах, за контрольну-модульну роботу та за виконання лабораторних робіт.

12. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота				Сума
Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2	Змістовий модуль 3	Екзамен	100
T.1.1- 1.6	T.2.1- 2.3	T.3.1- 3.3		
20	20	20	40	

Шкала оцінювання: національна та ECTS

1. При первинному складанні

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, диференційованого заліку, курсового проекту (роботи), практики	для заліку
90 – 100	A	відмінно	зараховано
82-89	B	добре	
75-81	C		
64-74	D	задовільно	
60-63	E		
0-59	FX	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
	F*	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

При перескладанні підсумкового контролю максимальна кількість балів зменшується до 80.

13. Методичне забезпечення

1. Опорні конспекти лекцій;
2. Інтерактивний комплекс навчально-методичного забезпечення дисципліни (ІКНМЗД);
3. Нормативні документи; ілюстративні матеріали, тощо.

14. Рекомендована література

Перелік навчально-методичної літератури:

1. Современная кристаллография В 4 т. Т.2.- М.: Наука, 1979. - 511 с.
2. Зенгуил К. Физика поверхности. М.: Наука, 1988.- 468 с.
4. Овруцкий А.М. Молекулярна фізика: Навчальний посібник. - Дніпропетровськ: Вид-во ДДУ, 2004. - 252 с.
5. Овруцкий А.М., Спиридонова И.М. Моделирование процессов кристаллизации. Днепропетровск.: ДДУ, 1985.- 102с.

6. Годунов С.К.,Рябенкий В.С. Разностные схемы (введение в теорию). М.: Наука. 1977.- 290 с.
7. Овруцкий А.М. Фізика на Паскалі.- Дніпропетровськ: Інновація, 2006.- 224 с.
8. Эксперимент на дисплее. М., "Наука" – 1988.- 99 с.
9. Х.Гуд, Я.Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. М.: МИР. 1990, – 707 с.
10. Хеерман Л.В.. Методы компьютерного моделирования в теоретической физике. М.: Наука. 1990.- 390 с.
15. Белащенко М.Д. Моделирование систем с большим числом частиц. М.: Наука, 2004 – 428 с.

3.3. Методична література

1. Моделирование физических явлений и процессов - Новосибирск, НГУ, 1986 - 87 с.
2. Інструкції до лабораторних робіт з курсу “ Комп’ютерне моделювання поверхневих процесів”. – методичні матеріали кафедри

15. Інформаційні ресурси

1. Наукова бібліотека ім. О. Гончара Дніпропетровського національного університету (м. Дніпропетровськ, вул. Козакова, 8).
2. Інтернет.

16. Структура рейтингової системи оцінювання

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

Кафедра фізики твердого тіла та оптоелектроніки

Дисципліна „ Комп’ютерне моделювання у фізиці конденсованого стану “

Академічна група КФ-15-1

Навчальний рік 2016 / 2017

Семестр 4 (залік)

Елементи контролю за 1-3 модулем

Вид контролю	Кількість завдань	Кількість балів		Тиждень подачі або проведення
		за одиницю контролю	всього	
1. Опитування для перевірки засвоєння лекційного матеріалу	1	5	5	тиждень
2. Перевірка виконання лабораторних робіт, та їх захист	2	7,5	15	тижні
<i>Всього за змістовим модулем 1</i>		<i>30 балів</i>		
1. Опитування для перевірки засвоєння лекційного матеріалу	1	5	5	тижні
2. Перевірка відповідей на запитання контрольно-модульної роботи	1	5	5	тижні
3. Перевірка виконання лабораторних робіт, та їх захист	2	5	10	тижні
<i>Всього за змістовим модулем 2</i>		<i>40 балів</i>		
1. Опитування для перевірки засвоєння лекційного матеріалу	1	5	5	тижні
2. Перевірка підготовки самостійної роботи за темами індивідуальних завдань	1	6	6	тижні
3. Перевірка виконання лабораторних робіт, та їх захист	3	3	9	тижні
<i>Всього за змістовим модулем 3</i>		<i>30 балів</i>		
Разом		100 балів		

Викладач-екзаменатор _____доцент Пляка С.М.

Викладач, який проводить лабораторні заняття _____доцент Пляка С.М.

Затверджено на засіданні кафедри, протокол № 11 від 23.05. 2016 р.

Завідувач кафедри _____/Трубіцин М.П. /