

**АННОТАЦИЯ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ
«Методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния»**

по основной профессиональной образовательной программе по направлению подготовки
03.06.01 «Физика и астрономия» (уровень подготовки научно-педагогических кадров)

Направленность (профиль): Физика конденсированного состояния

Общий объем дисциплины – 4 з.е. (144 часов)

Форма промежуточной аттестации – Зачет.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен обладать следующими компетенциями:

- ОПК-1: способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий;
- ПК-1: готовность применять основные законы образования кристаллических систем и их поведения в условиях внешнего температурного и силового воздействия для решения практических задач в области материаловедения;
- ПК-2: способность применять основы атомной и квантовой теории строения твердых тел для анализа и прогнозирования свойств получаемых материалов;
- ПК-3: владение основными методами исследования конденсированных тел, навыками проведения физического эксперимента и работы на современной научной аппаратуре;
- ПК-4: владение понятийным аппаратом физики конденсированного состояния и умение осваивать специальную информацию при чтении научно-технической литературы;

Содержание дисциплины:

Дисциплина «Методы компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния» включает в себя следующие разделы:

Форма обучения очная. Семестр 6.

1. Моделирование квантовых систем.. Методы численного решения уравнения Шредингера. Моделирование колебаний двухатомной молекулы в квазиклассическом приближении. Оценка энергии основного состояния. Методы описания возбужденных состояний..

2. Моделирование систем методом молекулярной динамики.. Моделирование функции радиального распределения. Определение температуры плавления по скрытой теплоте плавления. Определение температурного коэффициента линейного расширения металла. Изучение влияния размера металлических наночастиц на их температуру плавления. Определение энергии активации миграции собственного межузельного атома. Дислокации несоответствия на границе раздела двух металлов. Моделирование миграции границы зерен наклона..

Разработал:

доцент
кафедры Ф

Проверил:
Декан ФСТ

А.В. Попов

С.В. Ананьин