

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Кемеровский государственный университет

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан физического факультета

Ф. В. Титов

2015 г.



Рабочая программа дисциплины

Компьютерное моделирование в физике твердого тела

Направление подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки

Физическое материаловедение

Уровень бакалавриата

Форма обучения

очная

Кемерово 2015

Рабочая программа дисциплины утверждена Ученым советом Физического факультета (протокол Ученого совета факультета № 7 от 20 февраля 2012 г.)

Утверждена с обновлениями Ученым советом Физического факультета (протокол Ученого совета факультета № 7 от 25 февраля 2013 г.)

Утверждена с обновлениями Ученым советом Физического факультета (протокол Ученого совета факультета № 9 от 17 февраля 2014 г.)

Утверждена с обновлениями Ученым советом Физического факультета (протокол Ученого совета факультета № 11 от 20 февраля 2015 г.)

Рабочая программа дисциплины одобрена на заседании кафедры экспериментальной физики
Зав. кафедрой С. Д. Шандаков

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы по направлению <i>Физика</i> ...	4
2. Место дисциплины в структуре ООП бакалавриата	5
3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам занятий) и на самостоятельную работу обучающихся	5
3.1. Объем дисциплины по видам учебных занятий (в часах)	5
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий	6
4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)	6
4.2. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).....	6
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	7
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине.....	7
6.1 Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине	7
6.2 Типовые контрольные задания или иные материалы.....	8
6.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций...9	
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	10
а) основная учебная литература:	10
б) дополнительная учебная литература:	10
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины	10
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	11
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	11
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине	12
12. Иные сведения и (или) материалы	12
12.1. Перечень образовательных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	12
12.2. Особенности реализации дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья	14

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы по направлению *Физика*

В результате освоения ООП бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

<i>Код компетенции</i>	Результаты освоения ООП <i>Содержание компетенций</i>	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ОПК-3	Способностью использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач	<p>Знать:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Основные приближения реализованные в программном обеспечении позволяющие выполнять моделирования свойств твердых тел. 2. Преимущества и недостатки метода псевдопотенциала. <p>Уметь:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Определять необходимые значения для контроля точности расчета. 2. Анализировать вклады различных слагаемых в полную энергию кристалла. <p>Владеть:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Навыками сопоставления результатов компьютерного моделирования. 2. Методами определения адекватности полученных результатов основным физическим положением.
ОПК-5	Способностью использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией	<p>Знать:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Типы лицензий на программное обеспечение. 2. Характеристики ОС Linux. <p>Уметь:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Создавать пакетные файлы используя простейшие операторы. 2. Анализировать и выделять необходимую информацию представленную в кристаллографических базах данных и научных статьях. <p>Владеть:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Методами поиска информации на сайтах научных журналов. 2. Навыками работы с консолью.
ПК-1	Способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	<p>Знать:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Граничные условия. 2. Решения задачи для атома водорода. <p>Уметь:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Учитывать особенности моделирования свойств металлов, полупроводников и диэлектриков. 2. Анализировать зонную структуру твердых тел. <p>Владеть:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Методами теории групп.
ПК-2	способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта	<p>Знать:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Основные программные пакеты для моделирования свойств твердых тел. 2. Интегральные характеристики электронного строения твердых тел. <p>Уметь:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Инсталлировать необходимое программное обеспечение. 2. Соотносить возможности программного обеспечения и поставленных задач. <p>Владеть:</p>

		1. Приемами обработки полученных данных, а также визуализации результатов работы с применением современного программного обеспечения. 2. Навыками использования современного программного обеспечения в области физики твердого тела.
ПК-4	Способностью применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин	Знать: 1. Сильные и слабые стороны современных методов компьютерного моделирования. 2. Ограничения современных методов компьютерного моделирования. Уметь: 1. Определять необходимую точность расчетов исходя из условий задачи. 2. Определять метод расчета позволяющий получить результаты с необходимой точностью. Владеть: 1. Навыками создания входных файлов для проведения простейших расчетов. 2. Методами обработки выходных файлов.
ПК-5	Способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований	Знать: 1. Реализации уравнения Шредингера. 2. Основные принципы высокопроизводительных вычислений Уметь: 1. Определять точность полученных характеристик. 2. Задавать необходимые параметры для моделирования электронных свойств. 3. Строить карты распределения электронной плотности на плоскости и в пространстве. Владеть: 1. Навыками работы с современным программным обеспечением позволяющие выполнять расчет свойств материалов.

2. Место дисциплины в структуре ООП бакалавриата

Дисциплина «Компьютерное моделирование в физике твердого тела» реализуется в рамках базовой части Блока 1 «Дисциплины (модули)» программы бакалавриата.

Для освоения данной дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках освоения дисциплин модулей «Общая физика», «Математика», «Теоретическая физика», «Информатика».

Дисциплина изучается на 2 курсе в 4 семестре.

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 3 зачетные единицы (з.е.), 108 академических часов.

3.1. Объем дисциплины по видам учебных занятий (в часах)

Вид учебной работы	Всего часов
--------------------	-------------

Общая трудоемкость дисциплины	108
Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) (всего)	
Аудиторная работа (всего):	38
в т. числе:	
Лабораторные работы	38
в т.ч. в активной и интерактивной формах	36
Внеаудиторная работа (всего):	
В том числе - индивидуальная работа обучающихся с преподавателем:	
Творческая работа (реферат)	
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	70
Вид промежуточной аттестации обучающегося - Зачёт	

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)

№ п/п	Раздел дисциплины	Общая трудоемкость (час.)	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)			Формы текущего контроля успеваемости
			аудиторные учебные занятия		Самостоятельная работа обучающихся	
			всеобщее	практические занятия		
1.	Введение	8	-	2	6	Доклад
2.	Высокопроизводительные вычисления	14	-	4	10	Реферат
3.	Первопринципные методы расчета	48	-	18	30	Практические задания Собеседование
4.	Интегральные характеристики электронного строения твердых тел	38	-	14	24	Практические задания Собеседование

4.2 Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам)

№	Наименование раздела дисциплины	Содержание
<i>Темы практических занятий</i>		
1.1.	Введение	Общая характеристика современных компьютерных технологий. Использование компьютерных технологий в науке и производстве. Сравнительная характеристика. Характеристика лицензий программного обеспечения установленного в компьютерном классе.
1.2	Высокопроизводительные вычисления	Общая характеристика ОС Linux. Основы параллельных вычислений. Высокопроизводительные вычисления. Виртуализация приложений. Преимущества ОС Linux для высокопро-

№	Наименование раздела дисциплины	Содержание
		изводительных вычислений. Виртуальные машины. Облачные вычисления. Кластер КемГУ.
1.3	Первопринципные методы расчета	Применение численных методов в научных расчетах. Основные положения метода Хартри-Фока. Основные положения теории функционала плотности. Алгоритмы программной реализации. Выбор базиса. Влияние базиса на результаты расчетов. Определения параметров расчета для достижения заданной сходимости. Приложения для проведения научных расчетов. Основные возможности вычислительных пакетов.
1.4	Интегральные характеристики электронного строения твердых тел	Плотность состояний. Зарядовые состояния атомов. Методы определения атома в кристалле. Электронная заселенность. Заселенность атомов по Малликену. Классификация критических точек. Гессиан. Практические реализации метода Бейдера. Энергия связи. Энтальпия парообразования.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

1. Примеры входных файлов (сетевой диск в ауд. 1326).
2. Видеоуроки по настройке виртуальной машины и вычислительных пакетов (сетевой диск в компьютерном классе ауд. 1326).
3. Указания и справочный материал для проведения самостоятельных расчетов (сетевой диск в компьютерном классе ауд. 1326).
4. Электронное учебно-методическое пособие [3] (сетевой диск в компьютерном классе ауд. 1326).
5. Описание необходимых для выполнения расчетов команд пакета CRYSTAL и примеры их использования (сетевой диск в компьютерном классе ауд. 1326).

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

6.1 Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины (результаты по разделам)	Код контролируемой компетенции (или её части)	наименование оценочного средства
1.	Введение	ОПК-5 (Знать:1. Уметь:1,2. Владеть:1,2). ПК-1 (Знать:1, 2. Уметь:1,2. Владеть:1,2).	Реферат
2.	Высокопроизводительные вычисления	ОПК-5 (Знать:1,2. Уметь:1,2. Владеть:1,2). ПК-5 (Знать:2. Владеть:1).	Практические задания; контрольная работа; вопросы к зачету.
3.	Первопринципные методы расчета	ОПК-3 (Знать:1, 2. Уметь:1, 2. Владеть:1, 2). ПК –2 (Знать:1, 2. Уметь:1, 2. Владеть:1, 2).	Практические задания; контрольная работа; вопросы к зачету.
4.	Интегральные характеристики электронного строения твер-	ПК –4 (Знать:1, 2. Уметь: 1, 2. Владеть:1).	Практические задания; контрольная работа; во-

дых тел	ПК-5 (Знать:1, 2. Уметь: 1-3. Владеть:1).	просы к зачету.
---------	--	-----------------

6.2 Типовые контрольные задания или иные материалы

Темы рефератов по разделам дисциплин

Высокопроизводительные вычисления

1. Кластеры Beowulf.
2. Использование высокопроизводительных вычислений в физике твердого тела.
3. Применение высокопроизводительных вычислений в разработке нанотехнологий.
4. Возможности компьютерного моделирования в физике твердого тела.
5. Операционные системы используемые в высокопроизводительных вычислениях.
6. Облачные вычисления.
7. Параллельные вычисления.

Контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

В течение преподавания курса «Компьютерное моделирование в физике твердого тела» в качестве форм текущей аттестации студентов используются такие формы, как заслушивание и оценка доклада по теме реферата, собеседование при приеме результатов практических работ с оценкой, а также контрольная работа. По итогам обучения в 4-ем семестре проводится зачет.

Практические задания.

1. Настройка параметров виртуальной машины.
2. Запуск приложений с использованием виртуальной машины.
3. Создание файлов и работа с ними с использованием командной строки Linux.
4. Построить график потенциала Леннард-Джонса.
5. Построить график потенциала Морзе.
6. Определить равновесное расстояние для молекулы оксида углерода.
7. Выбор базисного набора.
8. Исследовать влияние базиса на вычисленные характеристики кристалла MgO.
9. Исследование влияние параметров SHRINK и TOLDEE на полную энергию кристалла MgO. Построить график зависимости полной энергии от параметра решетки.
10. Визуализация зависимости длины связи от точности расчета.
11. Определить равновесное значение постоянной решетки a кристалла MgO. Определить относительную и абсолютную погрешность для постоянной решетки a .
12. Построение карт электронной плотности MgO. Построение карт деформационной электронной плотности MgO. Привести карты: плоскость содержит четыре металла.
13. Определение ширины запрещенной зоны для кристалла MgO.
14. Сопоставление теоретических и экспериментальных данных для кристалла MgO.
15. Определение абсолютной и относительной погрешности параметра кристаллической ячейки кристалла MgO.
16. Плотность состояний кристалла MgO.
17. Анализ литературных данных для молекулы нафталина.
18. Повести анализ сходимости полной энергии молекулы в зависимости от выбранного базиса.
19. Оптимизация геометрии молекулы нафталина.
20. Визуализация электронной и деформационной плотности молекулы нафталина.

Пример варианта контрольной работы.

1. Исследование влияние параметров SHRINK и TOLDEE на полную энергию кристалла LiF. Построить график зависимости полной энергии от параметра решетки. Определить

равновесное значение постоянной решетки a . Определить относительную и абсолютную погрешность для постоянной решетки a . Построение карт электронной плотности. Построение карт деформационной электронной плотности. Привести карты: плоскость содержит четыре металла. Плоскость содержит четыре фтора. Оформить результаты в виде отчета.

Структура:

группа симметрии 225,

$a=4.02 \text{ \AA}$,

Li (0,0,0),

F (0.5; 0.5; 0.5).

Базис:

Li_61-1G_dovesi_1984

F_7-311G_nada_1993

2. Выполнить следующие задачи:

Оптимизация геометрии молекулы нафталина. Визуализация электронной и деформационной плотности. Оформить результаты в виде отчета.

Базис:

C_6-31d1G_gatti_1994

H_3-1p1G_gatti_1994

C10H8

C_{2v} (группа симметрии №15)

C 2.42 0.71 0.00

C 1.26 1.39 0.00

C 0.00 0.71 0.00

H 3.34 1.23 0.00

H 1.25 2.47 0.00

Примерные вопросы к зачету.

1. Высокопроизводительные вычисления.
2. Использование компьютерных технологий в науке и производстве.
3. Параметры влияющие на точность самосогласованного расчета.
4. Выбор базиса. Влияние базиса на результаты расчетов.
5. Общая характеристика ОС Linux.
6. Преимущества ОС Linux для высокопроизводительных вычислений.
7. Определения параметров расчета для достижения заданной сходимости.
8. Приложения для проведения научных расчетов.
9. Основные возможности вычислительных пакетов.
10. Методы определения атома в кристалле. Электронная заселенность. Заселенность атомов по Малликену. Энтальпия парообразования.

6.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций

Критерии оценки реферата:

1. Соответствие содержания теме и плану реферата
2. Приведена все необходимая информация для раскрытия темы реферата.
3. Используется литература из нескольких источников.
4. Проведен анализ информации.
5. Умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал.
6. Наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.
7. Соблюдение требований к оформлению.
8. При защите реферата необходимо кратко изложить цель работы и ответить на заданные вопросы.

Критерий оценки практических заданий:

1. Созданы правильные входные файлы.
2. Корректно записаны необходимые параметры.
3. Выбраны параметры, которые позволяют получить значения не только правильно, но и более быстро.
4. Графики зависимостей содержат все необходимые обозначения, которые необходимы для интерпретации результатов.
5. Студент правильно описал смысл используемых параметров и понимает, какое влияние они оказывают на полученные результаты.

Критерии оценки контрольной работы:

1. Создан правильный входной файл.
2. Исследование влияние параметров SHRINK и TOLDEE на полную энергию кристалла. Построен график зависимости полной энергии от параметра решетки. Определено равновесное значение постоянной решетки a . Определена относительная и абсолютная погрешность для постоянной решетки a .
3. Построены карты электронной плотности. Построены карты деформационной электронной плотности.
4. Определена полная энергия и межатомное расстояние для равновесной конфигурации молекулы.
5. Полученная конфигурация молекулы сопоставлена с литературными данными.

Критерии для зачета:

Для получения зачета студент должен успешно выполнить контрольную работу, которая демонстрирует степень усвоения практического материала, и ответить на вопросы.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) основная учебная литература:

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие / В. Г. Цирельсон .- М. : БИНОМ. Лаборатория знаний , 2012 .- 496 с. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3150 (дата последнего обращения: 02.02.2015).
2. Журавлев, Ю. Н. Химическая связь в полупроводниковых и диэлектрических кристаллах [Текст] : учеб. пособие / Ю. Н. Журавлев ; Кемеровский гос. ун-т, Кафедра теоретической физики. - Кемерово : б. и., 2009. - 207 с.

б) дополнительная учебная литература:

1. Басалаев, Ю. М. Практическое руководство по применению пакетов Quantum ESPRESSO и XCrySDen к расчету электронного строения кристаллов [Электронный ресурс]: эл. учеб.-метод. пособие / Ю. М. Басалаев, А. В. Кособуцкий, И. А. Федоров. - Электрон. текстовые дан. - Кемерово: Изд-во КемГУ, 2011. - 1 эл. опт. диск (CD-ROM). <http://edu.kemsu.ru/res/res.htm?id=14244>. (дата последнего обращения: 02.02.2015).
2. Басалаев, Ю. М. Моделирование электронных состояний в кристаллах : учеб. пособие / Ю. М. Басалаев; Кемеровский гос. ун-т .- Кемерово : Изд-во КемГУ , 2001 .- 167 с.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины

1. Моделирование свойств, электронной структуры ряда углеродных и неуглеродных нанокластеров и их взаимодействия с легкими элементами [Электронный ресурс]/ А.С. Фе-

доров [и др.]. г. Красноярск, <http://www.kirensky.ru/master/articles/monogr/Book/book.htm>. (дата последнего обращения: 02.02.2015).

2. Quantum ESPRESSO (<http://www.quantum-espresso.org/>) (дата последнего обращения: 02.02.2015).

3. OpenSuSE (<http://www.open-suse.ru>) (дата последнего обращения: 02.02.2015).

4. ABINIT (<http://www.abinit.org>) (дата последнего обращения: 02.02.2015).

5. Firefly (<http://classic.chem.msu.su/gran/games/tutorials.html>) (дата последнего обращения: 02.02.2015).

6. XCrySDen (<http://www.xcrysden.org>) (дата последнего обращения: 02.02.2015).

7. CRYSTAL (<http://www.crystal.unito.it>) (дата последнего обращения: 02.02.2015).

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

9.1. занятиям по подготовке к практическим занятиям

Для студентов физического факультета умение практического применения компьютерных знаний традиционно играет очень высокую роль. Очень часто, материал практического занятия основывается на практических навыках, которые были получены на предыдущих занятиях, поэтому пропуски очень быстро приводят к невозможности выполнять необходимые вычисления. В случае пропуска занятия необходимо обязательно решить все задачи самостоятельно. Примеры решения задач приведены в учебно-методическом пособии. В случае пропуска занятий, студент должен изучить материал самостоятельно. Для этой цели рекомендуется использовать литературу, указанную в рабочей программе, а также учебные материалы, которые есть на сетевом диске компьютерного класса.

9.2. по организации самостоятельной работы

Для эффективного усвоения материала студент должен регулярно посещать лабораторные занятия и выполнять плановую самостоятельную работу. Результаты самостоятельной работы по решению задач должны быть своевременно представлены преподавателю. Также в рабочей программе приведены примерные темы рефератов по разделам дисциплин, а также контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

9.3. по подготовке к контрольной работе

В рабочей программе приведены контрольные вопросы и задания для аттестации по итогам освоения дисциплины. Так как контрольная работа состоит из нескольких задач, которые необходимо решить за ограниченное время, то это налагает дополнительные условия. Помимо знаний, ключевое условие, которое играет важную роль для успешного решения контрольных задач, состоит в эффективном использовании времени. Рекомендуется просмотреть все задачи, чтобы сформировать приблизительный план работы и определить необходимые знания для каждой задачи. Одна из целей контрольной работы состоит в том, чтобы вскрыть проблемные места, поэтому рекомендуется решить все нерешенные задачи во время самостоятельной работы.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

При преподавании дисциплины используется компьютерный класс с установленным на компьютеры пакетом CRYSTAL. Необходимо наличие общей сетевой папки, в которой расположены методические указания и все необходимые материалы, необходимые на лабораторных занятиях (примеры входных файлов, руководства пользователя, электронные учебно-методические пособия). В процессе выполнения расчетов студенты самостоятельно выбирают необходимые базисные наборы, представленные на сайте разработчиков пакета CRYSTAL. Используя мультимедийный проектор, преподаватель демонстрирует некоторые особенности вычислительных пакетов и типичные ошибки.

Технологии, используемые при активной и интерактивной формах обучения

Неимитационные	Имитационные
Активные (проблемные) лекции и семинары	Кейс-технологии
Тематическая дискуссия (пресс-конференции)	Анализ конкретных ситуаций
Мозговая атака	Групповой тренинг
Презентация	

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для материально-технического обеспечения дисциплины «Компьютерное моделирование в физике твердого тела» используется: компьютерный класс магистерской подготовки физического факультета КемГУ.

12. Иные сведения и (или) материалы

12.1. Перечень образовательных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Практические занятия, индивидуальные работы, самостоятельные работы, разбор конкретных ситуаций, зачет.

При реализации программы дисциплины «Компьютерное моделирование в физике твердого тела» используются различные образовательные технологии – во время аудиторных занятий (38 часа) занятия проводятся в виде практических занятий с использованием специализированных вычислительных программ. Часть занятий посвящена разбору конкретных ситуаций, а самостоятельная работа студентов подразумевает работу под руководством преподавателей (консультации и помощь в написании рефератов и при выполнении практических работ (70 часов)) и индивидуальную работу студента (70 часов).

№	Аудиторное занятие	Содержание	Образовательная технология	Метод обучения	Активный метод обучения, способ реализации
	Практическое занятие	Общая характеристика современных компьютерных технологий. Использование компьютерных технологий в науке и производстве. Сравнительная характеристика лицензий программного обеспечения установленного в компьютерном классе.	Технология активного (контекстного) обучения	Первичное овладение знаниями – проблемно-поисковый метод	Коллективная исследовательская работа малыми группами - исследовательская игра: группа разбивается на подгруппы – лаборатории, в каждой из которых назначается руководитель (определяет цели и задачи, назначает ответственных за отдельные задачи, координирует работу и представляет отчет) и исполнители (ре-

					шают отдельные задачи и пишут по ним отчеты)
Практическое занятие	Общая характеристика ОС Linux. Основы параллельных вычислений. Высокопроизводительные вычисления. Виртуализация приложений. Преимущества ОС Linux для высокопроизводительных вычислений. Виртуальные машины. Облачные вычисления. Кластер КемГУ.	Технология модульного обучения	Первичное овладение знаниями - самостоятельное добывание знаний	Самостоятельная работа с обучающей программой (электронные учебники по CRYSTAL, виртуальной машине); самостоятельная работа с информационными базами данных (crystal.initio.it, virtualbox.org, icp.kemsu.ru, parallel.ru)	
Практическое занятие	Применение численных методов в научных расчетах. Основные положения метода Хартри-Фока. Основные положения теории функционала плотности. Алгоритмы программной реализации. Выбор базиса. Влияние базиса на результаты расчетов. Определения параметров расчета для достижения заданной сходимости. Приложения для проведения научных расчетов. Основные возможности вычислительных пакетов.	Технология дифференцированного обучения	Совершенствование знаний и формирование умений и навыков – творчески репродуктивный метод	Решение научной исследовательской задачи с применением расчетно-вычислительных методик и информационно-поисковых систем. Индивидуальное выполнение под контролем преподавателя научной исследовательской задачи.	
Практическое занятие	Плотность состояний. Зарядовые состояния атомов. Методы определения атома в кристалле. Электронная заселенность. Заселенность атомов по Малликену. Классификация критических точек. Гессиан. Практические реализации метода Бейдера. Энергия связи. Энтальпия парообразо-	Технология дифференцированного обучения	Совершенствование знаний и формирование умений и навыков – творчески репродуктивный метод	Решение научной исследовательской задачи с применением расчетно-вычислительных методик и информационно-поисковых систем. Индивидуальное выполнение под контролем преподавателя научной исследовательской задачи.	

		вания.			
--	--	--------	--	--	--

12.2. Особенности реализации дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Организационно-педагогическое сопровождение студента с ОВЗ направлено на контроль освоения образовательной программы в соответствии с графиком учебного процесса и типовым или индивидуальным учебным планом и включает в себя, при необходимости, контроль за посещаемостью занятий, помощь в организации самостоятельной работы, организацию индивидуальных консультаций, контроль по результатам текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации.

Для студентов с ОВЗ по слуху предусматривается применение сурдотехнических средств, таких как, техники для усиления звука, видеотехники, мультимедийной техники и других средств передачи информации в доступных формах для лиц с нарушениями слуха.

Для студентов с ОВЗ по зрению предусматривается применение технических средств усиления остаточного зрения, в том числе, специальные возможности операционных систем (электронные лупы, видеоувеличители), возможность масштабирования текста и другие средства передачи информации в доступных формах для лиц с нарушениями зрения.

Для студентов с нарушениями опорно-двигательной функции предусматривается применение компьютерной техники с соответствующим программным обеспечением (виртуальные лабораторные практикумы, мультимедийные учебные комплексы, тесты для самопроверки и контроля), а также, специальные возможности операционных систем, таких, как экранная клавиатура, и альтернативные устройства ввода информации.

В образовательном процессе для лиц с ОВЗ возможно использование различных форм организации on-line и off-line занятий (вебинары, виртуальные лекции, обсуждение вопросов освоения дисциплины в рамках видеосвязи, чатов, форумов), что дает возможность индивидуализации траектории обучения таких категорий граждан (индивидуализация содержания, методов, темпа учебной деятельности, внесения, при необходимости, требуемых корректировок в деятельность обучающегося и преподавателя). Электронное обучение, дистанционные образовательные технологии позволяют эффективно обеспечивать коммуникации студента с ОВЗ не только с преподавателем, но и с другими обучающимися в процессе познавательной деятельности.

Так как преподавание данной дисциплины осуществляется в мультимедийной аудитории, необходимый набор технических средств для работы со студентами с ОВЗ имеется.

Составитель:

Федоров И. А., к.ф.-м.н., доцент кафедры теоретической физики