

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Актуализировано:
на заседании кафедры
протокол № 8 от «16» июня 2017 г.

Согласовано:
Председатель УМК ФТИ

Зав. кафедрой



/Балапанов М.Х.



_____/Балапанов М.Х.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

дисциплина **Моделирование свойств металлов и сплавов. Метод молекулярной динамики.**

программа бакалавриата

Направление подготовки (специальность)

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки
Физика конденсированного состояния вещества

Квалификация
бакалавр

<p>Разработчик (составитель) д. физ.-мат. наук, профессор (должность, ученая степень, ученое звание)</p>	 <p>/ Назаров А.А. (подпись, Фамилия И.О.)</p>
--	--

Год приема: 2015

2017г.

Составитель / составители: _д.ф.-м.н., Назаров А.А

Рабочая программа дисциплины актуализирована на заседании кафедры общей физики
протокол № 8 от «16» июня 2017 г.

Зав. кафедрой  /Балапанов М.Х.

Заведующий кафедрой _____/

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы (*с ориентацией на карты компетенций*) 4
2. Цели и место дисциплины в структуре образовательной программы 5
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся) 5(15)
4. Фонд оценочных средств по дисциплине 6
 - 4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания 6
 - 4.2. Рейтинг-план дисциплины (при необходимости) 10(18)
 - 4.3. Задания для самостоятельной работы студентов по спецкурсу «Кристаллография» 12
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины 13
 - 5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины 13
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине 14

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

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП ВО по данному направлению подготовки:

- способности использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей (ОПК-2);

- способности использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач (ОПК-3);

- способности 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 (ПК-2);

- готовности применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований (ПК-3);

- способности пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований (ПК-5);

Табл. 1

Результаты обучения		Формируемая компетенция (код)	Примечание
Знания	1. Знать математические основы метода классической молекулярной динамики	ОПК-2	
	2. Знать физические основы метода классической молекулярной динамики	ОПК-3	
	3. Знать основные научные программы, реализующие метод молекулярной динамики и структурный анализ результатов моделирования.	ПК-2	
Умения	1. Использовать знания, полученные при изучении физических основ метода молекулярной динамики, при исследовании структуры конденсированных сред и процессов в них	ПК-2, ПК-3	
	2. Выбирать метод моделирования и описания межатомных взаимодействий для исследования конкретных физических систем	ОПК-3	
Владения (навыки / опыт деятельности)	1. Владеть навыками проведения исследований структуры конденсированных сред и процессов в них с использованием метода молекулярной динамики.	ПК-2,	
	2. Владеть навыками использования научных программ, реализующих метод молекулярной динамики и анализа атомной структуры металлов и сплавов по результатам моделирования.	ПК-5,	

2. Цели и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Моделирование свойств металлов и сплавов. Метод молекулярной динамики» является дисциплиной по выбору вариативной части ООП ВО по направлению подготовки 03.03.02 "Физика", профиль "Физика конденсированного состояния вещества".

Знания и умения, полученные в результате освоения курса «Моделирование свойств металлов и сплавов. Метод молекулярной динамики» позволяют проводить исследования структуры и свойств металлов и сплавов, в том числе наноструктурных, путем компьютерного моделирования. Изучение методов компьютерного моделирования материалов, широко используемых в физике материалов, является одним из необходимых элементов подготовки специалистов по данному профилю.

Дисциплина «Моделирование свойств металлов и сплавов. Метод молекулярной динамики» - одна из дисциплин профиля, непосредственно формирующих умения проводить самостоятельные научные исследования.

По предмету и методу своих исследований данный курс тесно связан с теоретической механикой, статистической физикой, физикой конденсированного состояния и численными методами решения математических задач.

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся).

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Код и формулировка компетенции

-способности использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей (ОПК-2);

Этап освоения компетенции (уровень)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 («Неудовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 «Хорошо»	5 «Отлично»
Первый этап (уро-	Знать:	Показы-	Имеет	Знает по-	Знает всё

вень)	. Знать математические основы метода классической молекулярной динамики	ваает полное знание материала или имеет фрагментарные знания небольшой части материала, допускает грубые ошибки	значительные пробелы в знаниях, допускает существенные ошибки в ответах	всё, допускает незначительные ошибки в ответах	
Второй этап (уровень)	1. Уметь моделировать свойства твердых тел путем изменения их кристаллической структуры и технологии синтеза.	Не умеет	Умеет, но допускает значительные ошибки	Умеет, допускает незначительные ошибки	Умеет в совершенстве
Третий этап (уровень)	1. Иметь навыки работы с научной и специальной литературой	Практически не владеет	Владеет слабо, допускает значительные ошибки	Владеет, допускает незначительные ошибки	Владеет в совершенстве

ОПК-3 - способность использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач;

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 («Неудовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 «Хорошо»	5 «Отлично»
Первый этап (уровень)	Знать: 1) Знать физические основы метода классической молекулярной динамики	Показывает полное знание материала или имеет фрагмен-	Имеет значительные пробелы в знаниях, допускает суще-	Знает почти всё, допускает незначительные ошибки в	Знает всё

		тарные знания небольшой части материала, допускает грубые ошибки	ственные ошибки в ответах	ответах	
Второй этап (уровень)	1. Уметь моделировать свойства твердых тел путем изменения их кристаллической структуры и технологии синтеза. 2. Определять основные направления технологического прогресса в области синтеза новых кристаллов.	Не умеет	Умеет, но допускает значительные ошибки	Умеет, допускает незначительные ошибки	Умеет в совершенстве
Третий этап (уровень)	1. Иметь навыки работы с научной и специальной литературой	Практически не владеет	Владеет слабо, допускает значительные ошибки	Владеет, допускает незначительные ошибки	Владеет в совершенстве

ПК-1: способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин;

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 «Не удовлетворительно»	3 «Удовлетворительно»	4 «Хорошо»	5 «Отлично»
Первый этап (уровень)		Показывает полное незнание материала или имеет фрагментарные знания небольшой части материала, допускает грубые ошибки	Имеет значительные пробелы в знаниях, допускает существенные ошибки в ответах	Знает почти всё, допускает незначительные ошибки в ответах	Знает всё
Второй этап (уровень)		Не умеет	Умеет, но допускает	Умеет, допускает	Умеет в совершенстве

			значи- тельные ошибки	ет не- значи- тельные ошибки	шенстве
Третий этап (уровень)		Практически не владеет	Владеет слабо, допускает значительные ошибки	Владеет, допускает незначительные ошибки	Владеет в совершенстве

- способности 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 (ПК-2);

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 «Не удовлетворительно»	3 «Удовлетворительно»	4 «Хорошо»	5 «Отлично»
Первый этап (уровень)	Знать: 1. Знать основные научные программы, реализующие метод молекулярной динамики и структурный анализ результатов моделирования..	Показывает полное незнание материала или имеет фрагментарные знания небольшой части материала, допускает грубые ошибки	Имеет значительные пробелы в знаниях, допускает существенные ошибки в ответах	Знает почти всё, допускает незначительные ошибки в ответах	Знает всё
Второй этап (уровень)	Уметь Использовать знания, полученные при изучении физических основ метода молекулярной динамики, при исследовании структуры конденсированных сред и процессов в них.	Не умеет	Умеет, но допускает значительные ошибки	Умеет, допускает незначительные ошибки	Умеет в совершенстве
Третий этап (уровень)	1. Владеть навыками проведения исследований структуры конденсированных сред и процессов в них с использованием метода молекулярной динамики.	Практически не владеет	Владеет слабо, допускает значительные ошибки	Владеет, допускает незначительные ошибки	Владеет в совершенстве

-готовности применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований (ПК-3);

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 «Не удовлетворительно»	3 «Удовлетворительно»	4 «Хорошо»	5 «Отлично»
Второй этап (уровень)	Использовать знания, полученные при изучении физических основ метода молекулярной динамики, при исследовании структуры конденсированных сред и процессов в них	Не умеет	Умеет, но допускает значительные ошибки	Умеет, допускает незначительные ошибки	Умеет в совершенстве
Третий этап (уровень)	Иметь навыки работы с научной и специальной литературой	Практически не владеет	Владеет слабо, допускает значительные ошибки	Владеет, допускает незначительные ошибки	Владеет в совершенстве

- способности пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований (ПК-5);

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 «Не удовлетворительно»	3 «Удовлетворительно»	4 «Хорошо»	5 «Отлично»
Второй этап (уровень)	1 Уметь выбирать метод моделирования и описания межатомных взаимодействий для исследования конкретных физических систем	Не умеет	Умеет, но допускает значительные ошибки	Умеет, допускает незначительные ошибки	Умеет в совершенстве
Третий этап (уровень)	1. Владеть навыками использования научных программ, реализующих метод молекулярной динамики и анализа атомной структуры металлов и сплавов по результатам моделирования.	Практически не владеет	Владеет слабо, допускает значительные ошибки	Владеет, допускает незначительные ошибки	Владеет в совершенстве

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих

этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Этапы освоения	Результаты обучения	Компетенция	Оценочные средства
1-й этап Знания	Знать математические основы метода классической молекулярной динамики	ОПК-2	Устный опрос Контрольная работа
	2. Знать физические основы метода классической молекулярной динамики	ОПК-3	Устный опрос Контрольная работа
	3. Знать основные научные программы, реализующие метод молекулярной динамики и структурный анализ результатов моделирования.	ПК-2, ПК-2	Устный опрос Контрольная работа
2-й этап Умения	1. Использовать знания, полученные при изучении физических основ метода молекулярной динамики, при исследовании структуры конденсированных сред и процессов в них	ПК-2, ПК-3	Устный опрос Курсовая работа
	2. Выбирать метод моделирования и описания межатомных взаимодействий для исследования конкретных физических систем	ОПК-3	Устный опрос Курсовая работа
3-й этап Владеть навыками	1. Владеть навыками использования научных программ, реализующих метод молекулярной динамики и анализа атомной структуры металлов и сплавов по результатам моделирования.	ПК-5,	Контрольная работа

Вопросы к текущему и рубежному контролю по теоретическому материалу

1. На каком приближении квантовой теории основано понятие классического потенциала взаимодействия атомов?
2. Какой характер имеет взаимодействие атомов в конденсированных средах (указать все основные особенности).
3. Дать понятие парных потенциалов. В чем их приближенность?
4. Записать выражения для наиболее известных парных потенциалов и описать смысл их подгоночных параметров. Нарисовать качественный график и указать основные характерные точки.
5. Что такое обрезание потенциала и зачем оно нужно? Какие значения имеет радиус обрезания?
6. Перечислить недостатки парных потенциалов.
7. Записать общий вид выражения для энергии атома в теории функционала плотности и описать ее составляющие.
8. Записать вид выражения для энергии атома в модели погруженного атома и объяс-

- нить все функции, входящие в него. Объяснить многочастичный характер метода.
9. Межатомные потенциалы для бинарных сплавов.
 10. Межатомные потенциалы для ковалентных кристаллов.
 11. Назвать и охарактеризовать методы минимизации энергии атомных систем. В чем сложность этой процедуры в плане поиска глобального минимума?
 12. Объяснить и записать суть метода МД.
 13. Перечислить примеры задач физики конденсированного состояния, решаемых методом МД.
 14. Описать ограничения классической МД.
 15. Описать роль поверхности при моделировании и расчетной ячейки.
 16. Объяснить периодические граничные условия.
 17. В чем состоит правило ближайшей частицы в МД и к какому ограничению на расчетную ячейку оно приводит?
 18. Записать алгоритм Верле для решения уравнений движения в МД.
 19. Объяснить использование и роль списка соседей в МД.
 20. Расчет кинетической, потенциальной и полной энергии в МД.
 21. Как строится калорическая кривая в МД? Как определить температуру плавления объемных кристаллов и наночастиц?
 22. Как рассчитать коэффициент диффузии в МД?
 23. Расчет давления в МД.
 24. Задание начальной температуры системы в МД.
 25. Методы моделирования систем с постоянной температурой: пропорциональный и дифференциальный термостаты.
 26. Методы моделирования систем с постоянной температурой: термостат Андерсена (стохастический метод).
 27. Моделирование систем с постоянным давлением: пропорциональный и дифференциальный баростаты.
 28. Координационный анализ структуры металлов.
 29. Параметр центральной симметрии.
 30. Анализ структуры металлов с помощью радиальной функции распределения.
 31. Программа молекулярно-динамического моделирования XMD. Ее использование. Основные команды XMD.

6.4. Типовые задачи, предлагаемые на семинарских занятиях и контрольных

1. Вывести выражение для силы в системе, взаимодействие в которой описывается потенциалом Ленарда-Джонса. Вывести связи между параметрами потенциала и характеристиками системы (параметром решетки, энергией связи).
2. Вывести выражение для силы в системе, взаимодействие в которой описывается потенциалом Морзе. Вывести связи между параметрами потенциала и характеристиками системы (параметром решетки, энергией связи, упругими модулями).
3. Записать список команд программы RasMol, со помощью которых атомы в одноатомной системе изображаются черными шарами диаметром 2,4 Å на белом фоне.
4. Записать список команд программы XMD, задающий проведение МД расчетов в течение 120 пс (шаг выбрать самостоятельно) при температуре 1000 К при постоянном давлении и последующую релаксацию при абсолютном нуле.

Тематика лабораторных работ:

1. Методы и программы визуализации результатов атомного моделирования.
2. Освоение методов и программ моделирования методом молекулярной динамики.

3. Исследование анизотропии коэффициента теплового расширения ГПУ металлов.
4. Моделирование краевой дислокации в г.ц.к. металлах.
5. Моделирование вакансий в г.ц.к. металлах.
6. Моделирование границ зерен в металлах.
7. Моделирование и исследование структуры аморфных металлов.
8. Моделирование плавления металлических наночастиц и кластеров.
9. Моделирование нанокристаллизации аморфных металлов при деформации.

4.3 Рейтинг-план дисциплины

Рейтинг–план дисциплины представлен в Приложении № 2.

Экзаменационные билеты

Билет состоит из двух теоретических вопросов. Образец экзаменационного билета предоставлен ниже.

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет»

Физико-технический институт

Кафедра общей физики

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

по дисциплине «Моделирование свойств металлов и сплавов.Метод МД»

Направление 03.03.02 «ФИЗИКА»

Профиль «Физика конденсированного состояния»

1. Общая характеристика методов моделирования в физике материалов
2. Основы метода молекулярной динамики (МД).

«Утверждаю» _____

Зав. кафедрой ОФ, профессор М.Х. Балапанов

Вопросы к экзамену

. Общая характеристика методов моделирования в физике материалов. Роль компьютерного моде-

лирования в физике материалов и в нанотехнологии. Уровни описания структуры материалов. Общая характеристика и классификация методов компьютерного моделирования материалов. Моделирование из первых принципов. Атомное моделирование. Дислокационное, микро- и макро-механическое моделирование

Потенциалы межатомного взаимодействия в классической молекулярной динамике. Квантовомеханическое обоснование классического межатомного потенциала. Парные потенциалы и их недостатки. Современные многочастичные потенциалы. Модель погруженного атома

Методы атомистического моделирования твердых тел. Методы минимизации энергии (молекулярная статика). Основы метода молекулярной динамики (МД). Суть метода МД. Связь МД со статистической физикой. Задачи, решаемые с помощью МД. Ограничения классической МД. Ячейка моделирования. Граничные условия. Правило ближайшей частицы. Список соседей.

Компьютерная визуализация атомных систем. Изучение и освоение программы визуализации RasMol.

Расчет структурных и термодинамических параметров в молекулярной динамике. **Кинетическая, потенциальная и полная энергии. Калорическая кривая. Определение температуры плавления объемных кристаллов и наночастиц. Расчет коэффициента диффузии. Расчет давления в МД.**

Моделирование систем с постоянными давлением и температурой. Задание исходной температуры при моделировании. Термостат Андерсена, интегральный метод, дифференциальный и пропорциональный термостаты для моделирования систем при постоянной температуре. Метод расширенной системы, ограничивающих условий при моделировании с постоянным давлением. Метод Паринелло и Рамэна.

Научные программы, реализующие метод МД. Программы XMD, LAMMPS, IMD. Команды XMD.

Методы анализа атомной структуры при моделировании. Координационный анализ. Параметр центральной симметрии. Анализ общих соседей атомных пар. Визуализация дефектов: точечные дефекты, дислокации, дефекты упаковки, границы зерен. Различение г.ц.к. и г.п.у. структур. Радиальная функция распределения

В рамках использования модульно-рейтинговой системы обучения и оценки успеваемости студентов итоговая оценка знаний студента по дисциплине производится по сумме баллов, полученных в рамках текущего и рубежного контроля знаний, умений и навыков в течение семестра, и баллов, полученных на экзамене.

За работу в семестре студент получает до 80 баллов за выполнение заданий в рамках текущего и рубежного контроля. Для допуска к экзамену студент должен набрать в семестре не менее 35 баллов и выполнить курсовую работу.

Максимальное количество баллов, получаемое студентом на экзамене, составляет 30 баллов.

Перевод оценки из 100-балльной в четырехбалльную производится следующим образом:

- отлично – от 80 до 110 баллов;
- хорошо – от 60 до 79 баллов;
- удовлетворительно – от 45 до 59 баллов;
- неудовлетворительно – менее 45 баллов.

Критерии оценивания ответа на экзамене:

Максимальная оценка – 30 баллов складывается из оценки за ответ на теоретические вопросы билета (два вопроса оцениваются максимально по 9 баллов каждый), из оценки за решение задачи (6 баллов) и оценок за ответы на дополнительные вопросы (два вопроса, оцениваемых каждый в 3 балла максимально).

За ответы на вопросы билета выставляется

- **15-18 баллов**, если студент дал полные, развернутые ответы на все теоретические

вопросы билета, продемонстрировал знание формул, терминологии, понимание физической сути явлений и экспериментов, умение последовательно и логично отвечать на вопросы билета в объеме рекомендованной литературы.

Студент без затруднений ответил на уточняющие вопросы преподавателя по материалам билета.

- **10-14 баллов** выставляется студенту, если студент раскрыл без серьезных ошибок оба теоретических вопроса, однако показал пробелы в знаниях 20-25 % объема билета. Не на все уточняющие вопросы были даны корректные ответы.

- **5-9 баллов** выставляется студенту, если даны ответы на оба теоретических вопроса в объеме 35-50 % от полного ответа. Студентом допущено несколько существенных ошибок в толковании основных понятий, законов и формул, описании основных экспериментов. Студент не дает удовлетворительных ответов на уточняющие вопросы по билету.

- **1-4 балла** выставляется студенту, если ответ на теоретические вопросы свидетельствует о непонимании и крайне неполном знании основных понятий, законов и экспериментов, или полностью отсутствует ответ на один вопрос и допущены серьезные ошибки и пробелы при ответе на второй вопрос. На уточняющие вопросы по билету не получены ответы или ответы на них в корне ошибочны.

За ответ на дополнительный вопрос на экзамене выставляется:

-3 балла, если студент дал исчерпывающе полный и правильный ответ;

- 2 балла, если ответ верен, но дан не в полном объеме учебной программы, или содержит незначительные ошибки;

- 1 балл, если ответ на вопрос дан, но содержит серьезные ошибки или большие пробелы в изложении;

- 0 баллов, если студент не ответил или ответил в корне неверно.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

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

Основная

1. Назаров А.А. Принципы и методы многоуровневого моделирования структуры материалов: приложения к наноструктурным металлам. В кн.: Всероссийская школа-конференция для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании». Лекции. Том 1. Математика, физика, химия.- Уфа, БГУ, 2008. с. 103-118.

2. Назаров А.А., Мулюков Р.Р. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии. Уфа: БашГУ, 2010.

3. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наук. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1990.

4. Мансури Г.А. Принципы нанотехнологии. Исследование конденсированных веществ малых систем на молекулярном уровне. М.: Мир, 2008.

7.2. Дополнительная

5. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х томах). М.: Мир, 1990.
6. Рит М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. РХД, 2005.

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть «Интернет»), необходимых для освоения дисциплины

Дополнительная и более подробная информация по методам и программам молекулярно-динамического моделирования и визуализации доступна по следующим адресам сети Интернет:

<http://xmd.sourceforge.net/>

<http://www.openrasmol.org/>, <http://www.rasmol.org/>

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для проведения лекционных занятий используется аудиторный фонд физико-технического института.

Лабораторные занятия проводятся в специализированном компьютерном классе и физико-технического института (412 кабинет). В таблице 5 приведены сведения об основном оборудовании, которое используется при выполнении лабораторных работ.

Табл. 5

Сведения об обеспеченности образовательного процесса специализированным и лабораторным оборудованием

№ п/п	Наименование вида учебных занятий	Перечень основного оборудования, используемого для проведения лабораторных занятий	Количество терминалов
1	2	3	
1	Лабораторные работы по моделированию	Моноблоки	15

Во время лекционных занятий используется ноутбук и проектор для показа презентаций, выполненных в Power Point Presentation или Open Office Impress.

При выполнении лабораторных работ используются свободно распространяемые программы RasMol (визуализация атомных систем) и XMD (молекулярная динамика)/

При анализе и обработке результатов моделирования, оформлении отчета студенты самостоятельно используют любые программы для построения графиков функций одной переменной (Excel, Grapher, Open Office Calc) и набора текста с рисунками, формулами (Microsoft Word, Open Office Writer).

Приложение № 1

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФИЗИКО - ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины _« Моделирование свойств металлов и сплавов. Метод молекулярной динамики"»

на 6 семестр
(наименование дисциплины)

 очная
форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
4	4/144
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	81,2
лекций	16
Лабораторные работы	48
Практические работы	16
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	1,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	10

Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету дифференцированно-му (Контроль)	52,8,8
--	--------

Форма контроля:
экзамен б семестр

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины "Моделирование свойств металлов и сплавов. Метод молекулярной динамики" на 6 семестр

Рабочую программу осуществляет:

профессор кафедры физики и технологии наноматериалов, д.ф. -
м.н. Назаров А.А.(лекции, лабораторные и практические занятия)

Зачетных единиц трудоемкости (ЗЕТ) - 4

Учебных часов:

лекций - 16

практических занятий - 16

лабораторных работ - 48

самостоятельная работа студентов - 26

КСР - 36

В том числе контактных часов - 82

Таблица 3

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов (лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа)	Кол-во часов аудиторной работы	Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам	Задания по самостоятельной работе студентов с указанием литературы, номеров задач	Количество часов самостоятельной работы	Форма контроля самостоятельной работы студентов (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
1	2	3	4	5	6	7	8
Модуль 1: Общая характеристика методов моделирования материалов и описание межатомного взаимодействия в конденсированных средах							
1.	Введение. Общая характеристика методов моделирования в физике материалов. Роль компьютерного моделирования в физике матери-	Лекция	2	[1]; [2], Введение	Понятие о многоуровневом описании и методах моделирования материалов [1]	2	Письменный опрос

	лов и в нанотехнологии. Уровни описания структуры материалов. Общая характеристика и классификация методов компьютерного моделирования материалов. Моделирование из первых принципов. Атомное моделирование. Дислокационное, микро- и макро-механическое моделирование						
2.	Потенциалы межатомного взаимодействия в классической молекулярной динамике. Квантовомеханическое обоснование классического межатомного потенциала. Парные потенциалы и их недостатки. Современные многочастичные потенциалы. Модель погруженного атома.	Лекция Практ. занятие	3 2	2, § 1.1-1.4 3 (с.60-69) 4, гл.2	Межатомные потенциалы для бинарных сплавов и ковалентных кристаллов [2] § 1.5, 1.6	2	Выборочный опрос, контрольная работа
Модуль 2. Математические основы классической молекулярной динамики							
3.	Методы атомистического моделирования твердых тел. Методы минимизации энергии (молекулярная статика). Основы метода молекулярной динамики (МД). Суть метода МД. Связь МД со статистической физикой. Задачи, решаемые с помощью МД. Ограничения классической МД. Ячейка моделирования. Граничные условия. Правило ближайшей частицы. Список соседей.	Лекция Практ. занятие	3 2	2, § 2, 3.1-3.6, 3.9 3, гл. 3 4, гл.5 [2], Л. п. № 2	Численные методы решения уравнений движения в молекулярной динамике 2, § 3.7, 3.8	4	Контрольная работа, решение задач Защита отчета
4	Компьютерная визуализация атомных систем. Изучение и	Лабораторная работа	8	[2], Л. п. № 1	Методы и программы визуализации результатов	2	Защита отчета

	освоение программы визуализации RasMol.				атомного моделирования		
Модуль 3. Моделирование физических систем и процессов методом молекулярной динамики							
5	Расчет структурных и термодинамических параметров в молекулярной динамике. Кинетическая, потенциальная и полная энергии. Калорическая кривая. Определение температуры плавления объемных кристаллов и наночастиц. Расчет коэффициента диффузии. Расчет давления в МД.	Лекция Практ. занятие Лабораторная работа	2 2 8	2, § 4.1-4.7 3, гл. 3 4, гл.5 [2], Л. п. № 3	Атомные напряжения и их расчет в молекулярной динамике	4	Выборочный опрос, контрольная работа, Защита отчета
6	Моделирование систем с постоянными давлением и температурой. Задание исходной температуры при моделировании. Термостат Андерсена, интегральный метод, дифференциальный и пропорциональный термостаты для моделирования систем при постоянной температуре. Метод расширенной системы, ограничивающих условий при моделировании с постоянным давлением. Метод Паринелло и Рамэна.	Лекция Практ. занятие Лабораторная работа	2 2 12	2, § 5.1-5.3 3, гл. 3 4, гл.5 [2], Л. п. № 5,8	Проведение расчетов методом молекулярной динамики	4	Защита отчета
7	Научные программы, реализующие метод МД. Программы XMD, LAMMPS, IMD. Команды XMD.	Лекция Практ. занятие Лабораторная работа	2 4 12	2, § 6.1-6.3 [2], Л. п. № 4	Проведение расчетов методом молекулярной динамики	4	Выборочный опрос, контрольная работа, Защита отчета
8	Методы анализа атомной структуры при моделировании. Координационный анализ. Пара-	Лекция Практ. занятие	2 4	2, § 8.1-8.4 [2], Л. п. № 7	Визуализация атомных энергий и напряжений	4	Выборочный опрос, контрольная работа, Защита отчета

	метр центральной симметрии. Анализ общих соседей атомных пар. Визуализация дефектов: точечные дефекты, дислокации, дефекты упаковки, границы зерен. Различение г.ц.к. и г.п.у. структур. Радиальная функция распределения	Лабораторная работа	8				
9							
		ИТОГО	16 16 48			26	зачет

Рейтинг – план дисциплины

«Моделирование свойств металлов и сплавов. Метод молекулярной динамики» на 6 семестр

(название дисциплины согласно рабочему учебному плану)

направление «Физика»,

профиль «Физика конденсированного состояния вещества»

курс 3, семестр 6

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			Минимальный	Максимальный
Модуль 1.				
Текущий контроль				
1. Устный опрос	4	2	0	8
2. Лабораторные работы	4	2		8
Рубежный контроль				
1. Контрольная работа	14	1	0	14
Модуль II.				
Текущий контроль				
1. Устный опрос	8	2	0	16
2. Лабораторные работы	4	2		8
Рубежный контроль				
1. Контрольная работа	14	1	0	14
Модуль III.				
Текущий контроль				
3. Устный опрос	6	2	0	12
Рубежный контроль				
1. Контрольная работа	1	1	0	8
Поощрительные баллы				
Участие в научных конференциях			0	10
Итого поощрительных баллов			0	10
Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6
2. Посещение практических занятий			0	-10
Итоговый контроль				
Экзамен	9 (вопрос билета)	2 вопроса	Макс. 18 б.	30
	3 (доп. вопрос)	2	Макс. 6 б.	
	6 (задача)	1	Макс. 6 б.	

5.