

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

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Актуализировано:  
на заседании кафедры  
протокол № 6 от «6» июня 2018 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: 2018

2018г.

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

Рабочая программа дисциплины актуализирована на заседании кафедры общей физики  
протокол № 6 от «6» июня 2018 г.

Зав. кафедрой  /Балапанов М.Х.

## 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

			значительные ошибки	ет незначительные 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)	1 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 6 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
<b>Модуль 1: Общая характеристика методов моделирования материалов и описание межатомного взаимодействия в конденсированных средах</b>							
1.	<b>Введение.</b> Общая характеристика методов моделирования в физике материалов. Роль компьютерного моделирования в физике материала-	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.	<b>Потенциалы межатомного взаимодействия в классической молекулярной динамике.</b> 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
<b>Модуль 2. Математические основы классической молекулярной динамики</b>							
3.	<b>Методы атомистического моделирования твердых тел.</b> 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	<b>Компьютерная визуализация атомных систем.</b> Изучение и	Лабораторная работа	8	[2], Л. п. № 1	Методы и программы визуализации результатов	2	Защита отчета

	освоение программы визуализации RasMol.				атомного моделирования		
<b>Модуль 3. Моделирование физических систем и процессов методом молекулярной динамики</b>							
5	<b>Расчет структурных и термодинамических параметров в молекулярной динамике.</b> 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	<b>Моделирование систем с постоянными давлением и температурой.</b> 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	<b>Научные программы, реализующие метод МД.</b> 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	<b>Методы анализа атомной структуры при моделировании.</b> 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
<b>Модуль 1.</b>				
Текущий контроль				
1. Устный опрос	4	2	0	8
2. Лабораторные работы	4	2		8
Рубежный контроль				
1. Контрольная работа	14	1	0	14
<b>Модуль II.</b>				
Текущий контроль				
1. Устный опрос	8	2	0	16
2. Лабораторные работы	4	2		8
Рубежный контроль				
1. Контрольная работа	14	1	0	14
<b>Модуль III.</b>				
Текущий контроль				
3. Устный опрос	6	2	0	12
Рубежный контроль				
1. Контрольная работа	1	1	0	8
<b>Поощрительные баллы</b>				
Участие в научных конференциях			0	10
<b>Итого поощрительных баллов</b>			<b>0</b>	<b>10</b>
<b>Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)</b>				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6
2. Посещение практических занятий			0	-10
<b>Итоговый контроль</b>				
Экзамен	9 (вопрос билета)	2 вопроса	Макс. 18 б.	<b>30</b>
	3 (доп. вопрос)	2	Макс. 6 б.	
	6 (задача)	1	Макс. 6 б.	

**5.**