

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем сверхпластичности металлов
Российской академии наук**

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИПСМ РАН

Р.Р. Мулюков

2015 г.



**Рабочая программа учебной дисциплины
«Методы моделирования конденсированных сред»**

Составлена для аспирантов ИПСМ РАН, обучающихся по направлению 03.06.01 «Физика и астрономия», профиль «Физика конденсированного состояния»

Форма обучения

очная

Составитель

зав. лабораторией, д.ф.-м.н.

С.В. Дмитриев

Программа обсуждена и одобрена на заседании ученого совета ИПСМ РАН, протокол № 11-15 от 02 июля 2015 г.

Уфа 2015

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
1. Цель и задачи курса.....	3
1.1. Цель и задачи изучения дисциплины.....	3
1.2. Основные задачи изучения дисциплины.....	3
1.3. Компетенции, формируемые дисциплиной.....	3
2. Место дисциплины в учебном процессе	4
3. Объем дисциплины и виды учебной работы.....	4
4. Содержание дисциплины.....	4
4.1. Разделы дисциплины, трудоемкость (в часах) по видам занятий	4
4.2. Содержание разделов дисциплины.....	5
4.3. Семинарские занятия	6
4.4. Лабораторные занятия.....	6
4.5. Самостоятельная работа.....	7
5. Текущая и промежуточная аттестация. Фонд оценочных средств.....	7
5.1. Организация текущего контроля освоения материала	7
5.2. Промежуточная аттестация.....	8
6. Материальное обеспечение дисциплины.....	10
7. Учебная литература для самостоятельной работы.....	10
7.1. Основная литература	10
7.2. Дополнительная литература	10

Введение

Настоящая учебная программа составлена в соответствии с Федеральным законом «Об образовании в Российской Федерации» от 29.12.2012 г. № 273-ФЗ, Приказом Министерства образования и науки РФ от 19.11.2013 №1259 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)», федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 03.06.01 «Физика и астрономия» (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденным приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30 июля 2014 г. N 867, с изменениями, утвержденными Приказом Минобрнауки России от 30.04.2015 г. № 464 «О внесении изменений в федеральные государственные образовательные стандарты высшего образования (уровень подготовки кадров высшей квалификации)», паспортом специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния», Уставом ИПСМ РАН и положениями, регламентирующими работу аспирантуры ИПСМ РАН.

1. Цель и задачи изучения дисциплины

1.1. Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов умений и навыков компьютерного моделирования структуры реальных кристаллических материалов и процессов в них.

1.2. Основные задачи изучения дисциплины

В результате изучения дисциплины аспирант должен знать:

- методы численного моделирования конденсированных сред;
- перспективы развития компьютерного моделирования материалов.

Аспирант должен уметь:

- выбирать методы и программы для моделирования твердых тел в соответствии с исследовательскими задачами;
- разрабатывать собственные программы для построения систем для моделирования;
- анализировать структуру и свойства материалов по результатам моделирования.

Аспирант должен приобрести навыки:

- владения компьютерными методами физики конденсированных сред;
- владения методами анализа результатов численного моделирования с использованием современных методов и программ.

1.3. Компетенции, формируемые дисциплиной:

Дисциплина участвует в формировании следующих компетенций:

общепрофессиональных -

- способности самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

профессиональных -

- способности к самостоятельной разработке экспериментальных и теоретических методик изучения структуры, механических характеристик и физических свойств металлов и сплавов (ПК-1);
- готовности использовать знания и передовые отечественные и зарубежные достижения в области физики конденсированного состояния при проведении научных

исследований и разработке перспективных материалов с определенными свойствами, методов их обработки, конструкций, приборов и устройств на их основе (ПК-2).

2. Место дисциплины в учебном процессе

Дисциплина «Методы моделирования конденсированных сред» преподается во 2-й год обучения аспиранта и относится к дисциплинам вариативной части для профиля «Физика конденсированного состояния», изучаемым по выбору аспиранта.

Данная дисциплина базируется на следующих дисциплинах первых двух уровней высшего образования по направлению «Физика и астрономия»: квантовая теория, кристаллография, физика твердого тела, численные методы.

Знания, умения и навыки, приобретенные в результате изучения дисциплины «Методы моделирования конденсированных сред», используются в научно-исследовательской работе аспиранта и подготовке диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

3. Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов / зачетных единиц	Год
		3
Общая трудоемкость дисциплины	108 / 3	108
Аудиторные занятия	36 / 1	36
Лекции	18 / 0,5	18
Семинарские занятия	6 / 0,17	6
Лабораторные занятия	12 / 0,33	12
Самостоятельная работа	72 / 2	72
Вид итогового контроля		зачет

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы дисциплины, трудоемкость (в часах) по видам занятий

№	Название раздела	Всего часов	Аудиторные часы			Самостоятельная работа
			Лекции	Семинары	Лабораторные занятия	
1	Общая характеристика и классификация вычислительных методов физики конденсированных сред	10	2			8
2	Потенциалы межатомного взаимодействия	10	2			8
3	Основы метода классической	10	2			8

	молекулярной динамики					
4	Применение метода молекулярной динамики в разделах физики конденсированных сред	16	2	2	4	8
5	Квантово-механические методы моделирования твердых тел	14	2	2		8
6	Метод Монте-Карло в физике твердого тела	14	2	2	4	8
7	Визуализация и численный анализ атомной структуры твердых тел	14	2			8
8	Дискретное дислокационное моделирование	14	2		4	8
9	Методы микромеханического моделирования кристаллов	10	2			8
	Итого	108	18	6	12	72

4.2. Содержание разделов дисциплины

1. Общая характеристика и классификация вычислительных методов физики конденсированных сред

Многоуровневый характер структуры реальных кристаллов и методов их описания. Описание из первых принципов. Атомистическое моделирование. Дислокационное моделирование. Моделирование пластичности кристаллов. Континуальное моделирование.

2. Потенциалы межатомного взаимодействия

Квантовомеханическое обоснование классического межатомного потенциала. Парные потенциалы и их недостатки. Потенциалы, основанные не на первопринципных подходах и учитывающие многочастичный характер взаимодействия. Модель погруженного атома. Межатомные потенциалы для бинарных сплавов и ковалентных кристаллов.

3. Основы метода классической молекулярной динамики

Молекулярная статика как частный случай молекулярной динамики. Методы градиентного спуска. Роль исходной структуры в минимизации энергии атомных систем.

Физические 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. Решение уравнений движения. Список соседей.

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. Атомные напряжения и их расчет в МД.

Моделирование систем с постоянными давлением и температурой.

Научные программы, реализующие метод МД: XMD, IMD.

4. Применение метода молекулярной динамики в разделах физики конденсированных сред

Применение методов молекулярного моделирования при исследовании наноструктур и процессов нанотехнологии. Металлические кластеры и наночастицы. Моделирование фазовых переходов плавления и кристаллизации в кластерах и наночастицах.

Моделирование пластической деформации нанокристаллов.

5. Квантово-механические методы моделирования твердых тел

Квантовая молекулярная динамика. Метод Кара-Паринелло. Понятие о теории функционала плотности. Моделирование конденсированных сред методом функционала плотности.

6. Метод Монте-Карло в физике твердого тела

Основы метода Монте-Карло. Расчет средних по статистическому ансамблю. Существенная выборка. Алгоритм Метрополиса. Моделируемый отжиг. Генераторы случайных чисел.

7. Визуализация и численный анализ атомной структуры твердых тел

Методы и программы визуализации атомных систем. Методы анализа атомной структуры. 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.

8. Дискретное дислокационное моделирование

Динамика дислокаций и взаимодействие между ними. Двумерная дислокационная динамика и ее возможности. Трехмерная дислокационная динамика. Проблемы и перспективы дислокационного моделирования.

9. Методы микромеханического моделирования кристаллов

Теория пластичности кристаллов. Метод Тейлора. Метод самосогласованной вязкопластичности. Моделирование эволюции текстуры при пластической деформации.

4.3. Семинарские занятия

В курсе запланировано три семинарских занятия по следующим темам:

1. Применение метода молекулярной динамики в разделах физики конденсированных сред.

2. Квантово-механические методы моделирования твердых тел.

3. Метод Монте-Карло в физике твердого тела.

На этих занятиях будут обсуждаться свежие публикации по применению методов компьютерного моделирования в исследовании структуры твердых тел и процессов в них.

4.4. Лабораторные занятия

В курсе запланировано три лабораторных занятия по следующим темам:

1. Моделирование поведения листа графена под воздействием сдвиговых и растягивающих напряжений.

2. Моделирование диффузии в модельном двумерном кристалле методом Монте-Карло.

3. Дискретное дислокационное моделирование поведения системы краевых дислокаций при низких температурах.

4.5. Самостоятельная работа

В курсе запланировано 72 часа на самостоятельную работу аспирантов, которая включает в себя самостоятельную проработку и расширенное изучение материала, систематизацию, закрепление знаний и подготовку к сдаче зачета.

5. Текущая и промежуточная аттестация. Фонд оценочных средств

5.1. Организация текущего контроля освоения материала

Текущий контроль знаний по дисциплине «Методы моделирования конденсированных сред» осуществляется путем устных или письменных опросов по вопросам пройденных тем с использованием вопросов для текущего контроля, по выступлениям на семинарских занятиях, выполнению лабораторных работ, а также задания, направленного на проверку сформированности компетенций при изучении дисциплины.

Объектами оценивания при текущем контроле выступают:

- учебная дисциплина - активность на занятиях, своевременность выполнения различных видов заданий, посещаемость занятий;
- степень усвоения теоретических знаний;
- степень сформированности компетенций.

Примерный перечень вопросов для подготовки аспирантов к текущему контролю теоретических знаний

1. Как в квантовой механике обосновывается классический межатомный потенциал?
2. Парные потенциалы и их примеры.
3. Какими параметрами подгоняются парные потенциалы?
4. Каковы недостатки парных потенциалов?
5. Модель погруженного атома.
6. Парные межатомные потенциалы для бинарных сплавов
7. Межатомные потенциалы для бинарных сплавов в модели погруженного атома.
8. Примеры межатомных потенциалов для ковалентных кристаллов.
9. Методы минимизации энергии атомных систем.
10. Роль исходной структуры при минимизации энергии.
11. Методы приближения к глобальному минимуму.
12. Метод гамма-поверхности при исследовании двумерных дефектов.
13. Методы определения стабильной конфигурации атомных кластеров.
14. Суть метода МД.
15. Связь МД со статистической физикой.
16. Задачи, решаемые с помощью МД.
17. Ограничения классической МД.
18. Ячейка моделирования. Граничные условия.
19. Правило ближайшей частицы.
20. Решение уравнений движения.
21. Список соседей.
22. Расчет кинетической, потенциальной и полной энергии в МД.
23. Калорическая кривая. Определение температуры плавления объемных кристаллов и наночастиц.
24. Расчет коэффициента диффузии в МД.
25. Расчет давления в МД.
26. Атомные напряжения и их расчет в МД.
27. Моделирование систем с постоянным давлением интегральными методами.

28. Моделирование систем с постоянным давлением дифференциальным методом.
29. Моделирование систем с постоянным давлением пропорциональным методом.
30. Задание начальной температуры при моделировании
31. Моделирование систем с постоянной температурой стохастическим методом.
32. Моделирование систем с постоянной температурой интегральным методом.
33. Моделирование систем с постоянной температурой дифференциальным методом.
34. Моделирование систем с постоянной температурой пропорциональным методом.
35. Координационный анализ.
36. Параметр центральной симметрии.
37. Анализ общих соседей атомных пар. Различение г.ц.к. и г.п.у. структур.
38. Радиальная функция распределения.
39. Основы метода Монте-Карло.
40. Расчет средних по статистическому ансамблю. Существенная выборка. Алгоритм Метрополиса.
41. Моделируемый отжиг.
42. Применение методов молекулярного моделирования при исследовании наноструктур.
43. Применение методов молекулярного моделирования при исследовании процессов нанотехнологии.
44. Металлические кластеры и наночастицы. Моделирование фазовых переходов плавления и кристаллизации в кластерах и наночастицах.
45. Моделирование пластической деформации нанокристаллов.
46. Динамика дислокаций и взаимодействие между ними.
47. Двумерная дислокационная динамика и ее возможности.
48. Трехмерная дислокационная динамика.
49. Теория пластичности кристаллов. Метод Тейлора.
50. Метод самосогласованной вязкопластичности.
51. Моделирование эволюции текстуры при пластической деформации.

Задание для оценки степени сформированности компетенций

Для демонстрации степени сформированности компетенций при изучении дисциплины аспирант самостоятельно выполняет задание следующего содержания.

1. Самостоятельно осуществляет выбор межатомного потенциала, метод моделирования, программу моделирования, режимы моделирования для решения одной из своих исследовательских задач (ПК-1).

2. Приводит пример решения одной из своих научно-исследовательских задач методом моделирования (ОПК-1).

3. Проводит анализ результатов своих исследования методом моделирования и сопоставление их с результатами отечественных и зарубежных исследований и на этой основе формулирует новые задачи научных исследований (ПК-2).

5.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация осуществляется с целью выявления степени освоения аспирантом теоретических знаний по дисциплине. Промежуточная аттестация проводится в форме зачета в конце 4-го семестра.

Обучающийся допускается к зачету или экзамену в случае выполнения всех учебных заданий, предусмотренных настоящей программой. В случае наличия учебной задолженности (пропущенных занятий и (или) невыполненных заданий) аспирант отрабатывает пропущенные занятия и выполняет задания.

Зачет проводится в письменно-устной форме. Аспиранту выдается задание в виде

двух из приведенного ниже перечня. Зачет проводится в аудитории, время на написание и подготовку к ответам 40 минут.

Оценка «зачтено» выставляется при правильном и достаточно полном ответе, правильно использующем специальную терминологию, и умении отвечать на дополнительные вопросы, непосредственно связанные с темой билета. При этом могут допускаться ошибки непринципиального характера.

Оценка «не зачтено» выставляется при недостаточно полном ответе, при неправильном использовании специальной терминологии, неумении отвечать на дополнительные вопросы, непосредственно связанные с темой билета, при наличии в ответе ошибок принципиального характера.

Получение зачета является необходимым условием аттестации аспиранта за второй год обучения.

Перечень вопросов для подготовки аспирантов к промежуточной аттестации по дисциплине

1. Квантовомеханическое обоснование классического межатомного потенциала.
2. Парные потенциалы и их недостатки.
3. Модель погруженного атома.
4. Межатомные потенциалы для бинарных сплавов
5. Межатомные потенциалы для ковалентных кристаллов
6. Методы минимизации энергии атомных систем. Роль исходной структуры.
7. Метод гамма-поверхности при исследовании двумерных дефектов.
8. Методы определения стабильной конфигурации атомных кластеров.
9. Суть метода МД. Связь МД со статистической физикой.
10. Задачи, решаемые с помощью МД. Ограничения классической МД.
11. Ячейка моделирования. Граничные условия. Правило ближайшей частицы.
12. Решение уравнений движения. Список соседей.
13. Расчет кинетической, потенциальной и полной энергии в МД.
14. Калорическая кривая. Определение температуры плавления объемных кристаллов и наночастиц.
15. Расчет коэффициента диффузии в МД.
16. Расчет давления в МД.
17. Атомные напряжения и их расчет в МД.
18. Моделирование систем с постоянным давлением.
19. Моделирование систем с постоянной температурой.
20. Координационный анализ. Параметр центральной симметрии.
21. Анализ общих соседей атомных пар. Различение г.ц.к. и г.п.у. структур.
22. Радиальная функция распределения.
23. Основы метода Монте-Карло.
24. Расчет средних по статистическому ансамблю. Существенная выборка. Алгоритм Метрополиса.
25. Моделируемый отжиг.
26. Применение методов молекулярного моделирования при исследовании наноструктур.
27. Применение методов молекулярного моделирования при исследовании процессов нанотехнологии.
28. Моделирование металлических кластеров и наночастиц.
29. Моделирование фазовых переходов плавления и кристаллизации в кластерах и наночастицах.
30. Моделирование пластической деформации нанокристаллов.

31. Динамика дислокаций и взаимодействие между ними.
32. Двумерная дислокационная динамика и ее возможности.
33. Трехмерная дислокационная динамика.
34. Теория пластичности кристаллов. Метод Тейлора.
35. Метод самосогласованной вязкопластичности.
36. Моделирование эволюции текстуры при пластической деформации

6. Материальное обеспечение дисциплины

Для проведения занятий используется аудитория, оснащенная компьютером, проектором и экраном.

7. Учебная литература для самостоятельной работы

7.1. Основная литература

1. Назаров А.А., Мулюков Р.Р. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии. Уфа: РИЦ БашГУ, 2010. - 156 с.
2. Мулюков Р.Р., Баимова Ю.А. Углеродные наноматериалы. Уч. пособие. Уфа: РИЦ БашГУ, 2015. - 160 с.
3. Полухин В.А., Ватолин Н.А. Моделирование аморфных металлов. - М.: Наука, 1985. - 288 с.
4. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1990.

7.2. Дополнительная литература

1. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х томах). М.: Мир, 1990.
2. Куксин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. Атомистическое моделирование пластичности и разрушения нанокристаллической меди при высокоскоростном нагружении. Физика твердого тела. 2008. Т. 50, вып. 11, с. 1984-1990.