

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Геолого-географический факультет

УТВЕРЖДАЮ:
декан геолого-географического
факультета


П.А. Тишин



17 июня 2022 г

Рабочая программа дисциплины

Компьютерное моделирование минеральных систем и кристаллических структур

по направлению подготовки
05.04.01 Геология

Направленность (профиль) подготовки
«Эволюция Земли: геологические процессы и полезные ископаемые»

Форма обучения
Очная

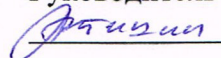
Квалификация
Магистр

Год приема
2022

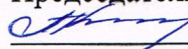
Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.ДВ.04.08

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

 П.А. Тишин

Председатель УМК

 М.А. Каширо

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-3 Способен самостоятельно обобщать результаты, полученные в процессе решения профессиональных задач, разрабатывать рекомендации их по практическому использованию

ПК-1 Способен решать стандартные и нестандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационных технологий, в т.ч. ГИС- и ГГИС-технологий

2. Задачи освоения дисциплины

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-3.1 Определяет критерии оценки и качество (качественные показатели) выполненных научных исследований / производственных работ (в соответствии с направленностью (профилем) магистратуры) в зависимости от поставленных задач

ИПК-1.2 На основе компьютерного комплексирования и обработки геологических данных создает цифровые модели геологических объектов и процессов

ИПК-1.3 Проводит комплексный анализ и интерпретацию геологической модели с целью получения новых данных для решения задач профессиональной деятельности

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Блок дисциплин по выбору в 4 семестре (выбрать 6 з.е.).

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине Семестр 4, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: общая физика; общая химия; программирование; кристаллохимия; компьютерные технологии в геологии.

Освоение данной дисциплины является теоретической и методической основой для дальнейшей научной работы выпускника.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых

– лекции: 4 ч.;

– практические занятия: 22 ч.

Объём самостоятельной работы определён учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Метод молекулярной динамики: основные принципы

История появления моделирования. Понятие модели, моделирования, адекватности модели. Требования к моделям. Процесс моделирования. Роль компьютерного

эксперимента в статистической физике. Модели многоатомных систем. Основная идея молекулярной динамики (МД). Описание модели. Область применения метода МД. Этапы моделирования в рамках метода МД. Гамильтониан моделируемой системы. Описание взаимодействия между атомами. Решение уравнений движения. Молекулярная динамика различных ансамблей.

Тема 2. Вычислительный эксперимент: термодинамические, структурные и кинетические свойства системы

Расчёт энергии системы. Понятие равновесия системы. Вычисление простых статистических величин. Расчёт температуры, давления, теплоёмкости. Свободная энергия Гельмгольца, энергия Гиббса, энтальпия, энтропия. Радиальная функция распределения атомов. Расчёт коэффициента диффузии. Визуальное представление модели. Анализ кристаллической решётки, поиск дефектов структуры (вакансии, дефекты упаковки, границы зёрен, дислокации, фазовые перестройки).

Тема 3. Вычислительный эксперимент: практика

Инициализация системы: задание кристаллической структуры, граничные условия. Изменение структуры при внешнем воздействии: температура, деформация сжатия/растяжения, сдвиговая деформация. Визуализация и анализ структуры материала.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости лекций и выполнения заданий на практических занятиях и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

Порядок формирования компетенций, результаты обучения, критерии оценивания и перечень оценочных средств для текущего контроля по дисциплине приведены в Фондах оценочных средств для курса «Компьютерное моделирование минеральных систем и кристаллических структур».

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет в четвёртом семестре проводится в письменной форме по билетам. Билет содержит теоретический вопрос и задачу. Продолжительность зачета 1,5 часа.

Примерный перечень теоретических вопросов

1. Модель. Виды моделей. Основные требования, предъявляемые к моделям.
2. Алгоритмы интегрирования уравнений движения.
3. Расчёт внутренней энергии и температуры

Примеры задач:

Задача представляет собой объяснение значения команд из скрипта для проведения компьютерного моделирования, рассмотренного на практическом занятии.

Знание ответов на вопросы свидетельствуют о формировании компетенции ОПК-3 в соответствии с индикатором ИОПК-3.1.

Решение задачи ставит своей целью проверку компетенции ПК-1 в соответствии с индикатором ИПК-1.3. Решение задачи второй части предоставляется в виде текста скрипта (ИПК-1.2).

Процедура проверки сформированности компетенций и порядок формирования итоговой оценки по результатам освоения дисциплины «Компьютерное моделирование минеральных систем и кристаллических структур» описаны в Фондах оценочных средств для данного курса.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=34554>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План практических занятий по дисциплине

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

Для эффективного освоения дисциплины студентам рекомендуется:

- после лекции просмотреть и обдумать текст конспекта (15 минут);
- накануне следующей лекции вспомнить материал предыдущей (15 минут);
- изучение теоретического материала по учебнику и конспекту (2 часа в неделю);
- подготовка к практическому занятию (1 час в неделю);
- работа с литературой (1 час в неделю).

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Feliciano Giustino. *Materials Modelling using Density Functional Theory: Properties and Predictions*. – Oxford: Oxford University Press, 2014. – 286 p.

– Ландау Л.Д., Ахиезер А.И., Лифшиц Е.М. *Механика и молекулярная физика*. – Долгопрудный: Интеллект, 2014. – 400 с.

– Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Статистическая физика. Часть 1*. – М.: Физматлит, 2013. – 620 с.

– Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. – М.: Физматлит, 2016. – 800 с.

– Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. *Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния*. – М.: Физматлит, 2015. – 440 с.

– Френкель Д. *Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям* / Даан Френкель, Беренд Смит ; пер. с англ. и науч. ред. В. А. Иванов, М. Р. Стукан. – М.: Научный мир, 2013. – 559 с. <https://koha.lib.tsu.ru/cgi-bin/koha/opac-detail.pl?biblionumber=361338>

б) дополнительная литература:

– Allen M.P., Tildesley D. J. *Computer simulation of liquids*. – Oxford: Oxford University Press, 2002. – 386 p.

– David S. Sholl, Janice A. Steckel. *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. – Hoboken: John Wiley & Sons, 2009. – 238 p.

– Daw M.S., Baskes M.I. *Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals* // *Phys. Rev. B*. – 1984. – V. 29. – No. 12. – P. 6443-6453.

– Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. *The embedded-atom method: a review of theory and applications* // *Mat. Sci. and Engr. Rep.* – 1993. – V. 9. – P. 251-310.

– Martin R.M. *Electronic structure: basic theory and practical methods*. – Cambridge: Cambridge University Press, 2004. – 624 p.

– Melker A.I. *Potentials of interatomic interaction in molecular dynamics* // *Rev. Adv. Mater. Sci.* – 2009. – V. 20. – P. 1-13.

– Белашенко Д.К. *Компьютерное моделирование жидких металлов* // *УФН*. – 2013. – Т. 183. – С. 1281-1322.

– Биндер К., Хеерман Д.В. *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*. – М.: Наука, 1995. – 144 с.

– Булавин Л.А., Выгорницкий Н.В., Лебовка Н.И. *Компьютерное моделирование физических систем*. – Долгопрудный: Интеллект, 2011. – 352 с.

– Гулд Х., Тобочник Я., *Компьютерное моделирование в физике*. – М.: Мир, 1990. – Т. 1. – 396с.; Т. 2. – 396с.

– Кирсанов В.В., Орлов А.Н. *Моделирование на ЭВМ атомных конфигураций дефектов в металлах* // *УФН*. – 1984. – Т. 142. – С. 219-264.

- Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // УФН. – 2000. – Т. 172. – С. 336-348.
- Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990. – 176 с.

в) ресурсы сети Интернет:

- Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000- . – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp?>
- ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>
- SpringerLink [Electronic resource] / Springer International Publishing AG, Part of Springer Science+Business Media. – Electronic data. – Cham, Switzerland, [s. n.]. – URL: <http://link.springer.com/>
- Interatomic Potentials Repository - <https://www.ctcms.nist.gov/potentials/>
- OVITO – Open Visualization Tool – <http://ovito.org>
- LAMMPS Molecular Dynamics Simulator - <https://www.lammps.org/>
- The periodic table of the elements – <https://www.webelements.com/>

13. Перечень информационных ресурсов

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
- LAMMPS: пакет моделирования многоатомных систем методом молекулярной динамики;
- OVITO: пакет анализа и визуализации результатов моделирования;
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения практических занятий, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, доступом к электронной информационно-образовательной среде и к информационным справочным системам.

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешенном формате («Актру»).

15. Информация о разработчиках

Лычагин Дмитрий Васильевич, заведующий кафедрой минералогии и геохимии геолого-географического факультета, профессор, доктор физико-математических наук.

Никонов Антон Юрьевич, доцент кафедры физики металлов физического факультета, кандидат физико-математических наук.