

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
материаловедения и индустрии наносистем
Академик РАН


В.М. Иевлев
подпись, расшифровка подписи

17.04.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.01.01 Атомное моделирование структуры и физико-химических процессов

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:** 04.03.02 Химия, физика и механика материалов
- 2. Профиль подготовки/специализация:** материаловедение и индустрия наносистем
- 3. Квалификация выпускника:** бакалавр
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** кафедра материаловедения и индустрии наносистем
- 6. Составители программы:** Прижимов Андрей Сергеевич, кандидат физико-математических наук
- 7. Рекомендована:** Научно-методический совет химического факультета протокол № 4 от 11.04.2024

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2025-2026

Семестр(ы): 3

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

ознакомление студентов с современными методами компьютерного моделирования и освоение методик атомного моделирования структуры и физико-химических процессов

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Б1. Часть, формируемая участниками образовательных отношений.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

| Код | Название компетенции | Код(ы) | Индикатор(ы) | Планируемые результаты обучения |
|------|---|---------|--|---|
| ПК-2 | Способен использовать знания о методах синтеза и свойствах материалов различного назначения, в том числе наноматериалов, для решения профессиональных задач | ПК-2.1. | Способен выбирать методы синтеза материалов различного назначения (в том числе наноматериалов) в соответствии с поставленной задачей | знать: основные возможности методов компьютерного моделирования структуры и физико-химических процессов уметь: выбирать метод компьютерного моделирования в соответствии с поставленной задачей владеть: современными методиками компьютерного моделирования |
| | | ПК-2.2. | Способен использовать знания о свойствах материалов для решения конкретных профессиональных задач | знать: классификацию дефектов, их определения и основные свойства уметь: рассчитывать межплоскостные расстояния, периоды сетки дислокаций, параметры сопряжения на межфазных границах; обрабатывать результаты исследований, владеть: современными методами исследования свойств материалов |

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час — 3/108

Форма промежуточной аттестации – зачет.

13. Трудоемкость по видам учебной работы

| Вид учебной работы | Трудоемкость | | | |
|--------------------------|-----------------|--------------|--------------|-----|
| | Всего | По семестрам | | |
| | | № семестра | № семестра 3 | ... |
| Контактная работа | | | | |
| в том числе: | лекции | 36 | 36 | |
| | практические | 36 | 36 | |
| | лабораторные | | | |
| | курсовая работа | | | |
| Самостоятельная работа | | | | |
| Промежуточная аттестация | - | - | - | |
| Итого: | 108 | 108 | | |

13.1. Содержание дисциплины

| № п/п | Наименование раздела дисциплины | Содержание раздела дисциплины | Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК |
|--------------------------------|---|--|---|
| 1. Лекции | | | |
| 1.1 | Методика компьютерного эксперимента | Метод молекулярно-динамического моделирования. Метод статической релаксации. Используемые парные и много частичные потенциалы. Метод погруженного атома. | https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6260 |
| 1.2 | Моделирование роста пленок и структуры внутренних поверхностей раздела. | Создание моделей монокристаллов, поликристаллов, тонких пленок. Кристаллизация из аморфного состояния. Создание моделей гетероструктур. Моделирование роста пленок, структуры межфазных и межзеренных границ. Вычисление функции радиального распределения атомов. | https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6260 |
| 2. Практические занятия | | | |
| 2.1 | Методика компьютерного эксперимента | Метод молекулярно-динамического моделирования. Метод статической релаксации. Используемые парные и много частичные потенциалы. Метод погруженного атома. | https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6260 |
| 2.2 | Моделирование роста пленок и структуры внутренних поверхностей раздела. | Создание моделей монокристаллов, поликристаллов, тонких пленок. Кристаллизация из аморфного состояния. Создание моделей гетероструктур. Моделирование роста пленок, структуры межфазных и межзеренных границ. Вычисление функции радиального распределения атомов. | https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6260 |

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

| № п/п | Наименование темы (раздела) дисциплины | Виды занятий (часов) | | | | |
|--------|---|----------------------|--------------|--------------|------------------------|-------|
| | | Лекции | Практические | Лабораторные | Самостоятельная работа | Всего |
| 1 | Методика компьютерного эксперимента | 18 | 18 | | 18 | 54 |
| 2 | Моделирование роста пленок и структуры внутренних поверхностей раздела. | 18 | 18 | | 18 | 54 |
| Итого: | | 36 | 36 | | 36 | 108 |

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Для успешного освоения дисциплины, необходимо

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
- выполнение практического задания.
- Работа с ЭУМК <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6260>

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

| № п/п | Источник |
|-------|---|
| 1 | Иевлев В.М. Тонкие пленки неорганических материалов: Механизм роста и субструктура : учеб. пособие / В.М. Иевлев. – Воронеж: ИПЦ ВГУ, 2008. – 496 с. |
| 2 | Готтштайн Г. Физико-химические основы материаловедения / Г. Готтштайн ; пер. с англ. К.Н. Золотовой, Д.О. Чаркина под ред. В.П. Зломанова. – М. : Бином. Лаборатория знаний, 2009. – 400 с. |

б) дополнительная литература:

| № п/п | Источник |
|-------|--|
| 3 | Павлов П.В. Физика твердого тела / П.В. Павлов, А.Ф. Хохлов. – М. : "Высшая школа", 1985. – 383 с. |
| 4 | Фридель, Ж. Дислокации / Ж. Фридель ; Пер. с англ. А.Л. Ройтбурда. – М. : Мир, 1967. – 643 с. |
| 5 | Хирт Д. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте; под ред. Э.М. Надгорного, Ю.А. Осипьяна .— М. : Атомиздат, 1972 .— 598 с. |

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

| № п/п | Источник |
|-------|---|
| 6 | http://www.elibrary.ru – научная электронная библиотека. |
| 7 | http://www.lib.vsu.ru – Зональная научная библиотека ВГУ. |

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

| № п/п | Источник |
|-------|----------|
| | |

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

Проведение текущей аттестации и самостоятельной работы по отдельным разделам дисциплины. • Работа с ЭУМК <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6260>

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Специальных технических средств не требуется

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

| № п/п | Наименование раздела дисциплины (модуля) | Компетенция(и) | Индикатор(ы) достижения компетенции | Оценочные средства |
|--|---|----------------|-------------------------------------|--------------------|
| 1 | Методика компьютерного эксперимента | ПКВ-2 | ПКВ-2.1 ПКВ-2.2 | Устный опрос |
| 2 | Моделирование роста пленок и структуры внутренних поверхностей раздела. | ПКВ-2 | ПКВ-2.1 ПКВ-2.2 | Устный опрос |
| Промежуточная аттестация форма контроля - зачет | | | | Комплект КИМ |

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

-
1. Метод центральных разностей для решения уравнений движения
 2. Метод Бимана для решения уравнений движения
 3. Метод предиктор-корректор для решения уравнений движения
 4. Алгоритм метода статической релаксации
 5. Алгоритм метода погруженного атома
 6. Расчет термодинамических величин и структурных функций
 7. Периодические граничные условия
 8. Алгоритм метода молекулярной динамики
 9. Алгоритм Верле для решения уравнений движения
 10. Метод Эйлера для решения уравнений движения
- Практические задания
1. Выполните расчет термодинамических величин
 2. Выполните расчет функции радиального распределения атомов
 3. Создайте модель ГЦК-кристалла
 4. Создайте модель ОЦК-кристалла
 5. Создайте модель кристалла со структурой NaCl
 6. Создайте модель кристалла со структурой CsCl
 7. Создайте модель аморфной пленки меди
 8. Создайте модель бикристалла палладий, содержащего межзеренную границу кручения
 9. Создайте модель бикристалла палладий, содержащего межзеренную границу наклона
 10. Постройте гистограммы распределения координат атомов в гетероструктуре пленка-подложка

Описание технологии проведения.

После получения студентом билета КИМ и бланка листа ответа, самостоятельно выполняются задания КИМ в письменной форме. Время подготовки 40 минут.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания.

Оценка “зачтено” ставится если студент дает полный и правильный ответ, раскрывая теоретические и практические аспекты вопроса, анализируя литературные источники по данному вопросу, аргументирует собственную позицию по данному вопросу

Оценка “незачтено” ставится при незнании или непонимании большей или наиболее существенной части содержания учебного материала

20.3 Фонд оценочных средств сформированности компетенций студентов, рекомендуемый для проведения диагностических работ

ПК-2 __ Способен использовать знания о методах синтеза и свойствах материалов различного назначения, в том числе наноматериалов, для решения профессиональных задач

Перечень заданий для оценки сформированности компетенции:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

1. Какие из типов симметрии кристаллов имеют одинаковое количество упругих модулей:
тетрагональная и ромбическая
тетрагональная и ромбоэдрическая
Моноклинная и триклинная
триклинная и ромбоэдрическая
ромбическая и ромбоэдрическая
верного ответа нет
2. Плоскостями двойникования в кристаллах являются
Плоскости с наименьшим вектором Бюргерса дислокации
Плоскости зеркального отражения, пересечения которых с поверхностью имеют вид прямолинейных границ
Плотноупакованные плоскости и плоскости дефекта упаковки;

{211}

Все ответы верны

3. По каким плоскостям и направлениям происходит пластическая деформация в металлах с ГЦК решеткой?

{110} <111>

{112} <110>

{111} <110>

{110}, {112}, {123} <111>

Верного ответа Нет

2) открытые задания (повышенный уровень сложности):

1. Определить плотность сплава FeCr, кристаллизующегося в ОЦК структуру с параметром решетки $a = 2,875 \text{ \AA}$.
2. ОЦК решетка состоит из атомов одного сорта, имеющих радиусы R . Пусть атомы, расположенные по диагонали куба, касаются друг друга. Определить плотность упаковки этой структуры.
3. Определить плотность упаковки ПК, ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток и решетки типа алмаза, считая атомы равновеликими шарами, касающимися друг друга.
4. Определить координационные числа и радиусы первой координационной сферы для решеток: простой кубической, ОЦК, ГЦК, ГПУ, типа алмаза

Критерии и шкалы оценивания заданий ФОС:

Для оценивания выполнения заданий используется балльная шкала:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

- 1 балл – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ (полностью или частично неверный).

2) открытые задания (тестовые, повышенный уровень сложности):

- 2 балла – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ (полностью или частично неверный).

3) открытые задания (мини-кейсы, средний уровень сложности):

- 5 баллов – задание выполнено верно (получен правильный ответ, обоснован (аргументирован) ход выполнения (при необходимости));
- 2 балла – выполнение задания содержит незначительные ошибки, но приведен правильный ход рассуждений, или получен верный ответ, но отсутствует обоснование хода его выполнения (если оно было необходимым), или задание выполнено не полностью, но получены промежуточные (частичные) результаты, отражающие правильность хода выполнения задания, или, в случае если задание состоит из нескольких подзаданий, верно выполнено 50% таких подзаданий;
- 0 баллов – задание не выполнено или выполнено неверно (получен неправильный ответ, ход выполнения ошибочен или содержит грубые ошибки).

Задания раздела 20.3 рекомендуются к использованию при проведении диагностических работ с целью оценки остаточных результатов освоения данной дисциплины (знаний, умений, навыков).