

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

Физический факультет



Рабочая программа дисциплины

**Компьютерное моделирование многоатомных систем**

по направлению подготовки

**03.03.02 Физика**

Направленность (профиль) подготовки:  
**«Фундаментальная физика»**

Форма обучения  
**Очная**

Квалификация  
**Бакалавр**

Год приема  
**2021**

Код дисциплины в учебном плане: Б.1.В.ДВ.01.07.10

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

 О.Н. Чайковская

Председатель УМК

 О.М. Сюсина

Томск – 2021

## **1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)**

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-3 – Способен использовать современные информационные технологии и программные средства при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности.;

– ПК-1 – Способен проводить научные исследования в выбранной области с использованием современных экспериментальных и теоретических методов, а также информационных технологий;

– ПК-3 – Способен разрабатывать алгоритмы и программы, применять методы компьютерного моделирования для решения задач профессиональной деятельности.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-3.2. Применяет общее и специализированное программное обеспечение для теоретических расчетов и обработки экспериментальных данных;

ИПК-1.2. Владеет практическими навыками использования современных методов исследования в выбранной области;

– ИПК-3.1 – Знает основы программирования, владеет навыками создания компьютерных моделей физических явлений и процессов.

## **2. Задачи освоения дисциплины**

– Освоить основные методы моделирования атомных систем (метод молекулярной динамики, метод Монте-Карло, теория функционала плотности), основные принципы построения и работы алгоритмов и набора статистики в компьютерном моделировании; уметь обрабатывать данные компьютерного эксперимента.

– Научиться применять представления о методах компьютерного моделирования, их возможностях и ограничениях для выбора метода и разработки алгоритмов для решения практических задач профессиональной деятельности.

## **3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы**

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, входит в модуль по выбору «Физика металлов».

## **4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине**

Семестр 7, зачет.

Семестр 8, зачет с оценкой.

## **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; математический анализ; линейная алгебра и аналитическая геометрия; дифференциальные уравнения; программирование; классическая механика; термодинамика и статистическая физика; квантовая механика; физика твердого тела.

## **6. Язык реализации**

Русский

## **7. Объем дисциплины (модуля)**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часа, из которых:

- лекции: 16 ч.;
- практические занятия: 56 ч.;
- в том числе практическая подготовка: 56 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

## **8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам**

Тема 1. Введение в компьютерное моделирование

История появления моделирования. Понятие модели, моделирования, адекватности модели. Требования к моделям. Абстрактные модели и их моделей. Вербальные модели. Кибернетические модели. Информационные модели. Статические и динамические модели. Дискретные и непрерывные модели. Детерминированные и стохастические модели. Моделирование и системный подход. Процесс моделирования. Роль компьютерного эксперимента в статистической физике. Модели многоатомных систем.

Тема 2. Метод молекулярной динамики: основные принципы

Основная идея молекулярной динамики (МД). Описание модели. Область применения метода МД. Этапы моделирования в рамках метода МД. Гамильтониан моделируемой системы. Взаимодействие между атомами. Решение уравнений движения. Ограничения метода МД.

Тема 4. Потенциалы межатомного взаимодействия

Приближение Борна-Оппенгеймера. Построение межатомных потенциалов. Парные потенциалы: потенциал жёстких сфер, потенциал Леннарда-Джонса, потенциал Морзе, потенциал Букингема. Недостатки парных потенциалов. Многочастичные потенциалы: метод погруженного атома, потенциал Финнеса-Синклера. Потенциал Стиллинджера-Вебера. Потенциал Терзоффа. Молекулярная динамика из первых принципов.

Тема 5. Численные методы интегрирования классических уравнений движения

Простейший алгоритм метода МД. Вычислительные приёмы: граничные условия, обрезка потенциала (простая обрезка, обрезка со сдвигом, метод ближайшего образа), инициализация, приведённые переменные. Расчёт сил взаимодействия. Интегрирование уравнений движения. Алгоритм Верле. Алгоритм Эйлера. Алгоритм чехарды (Leap Frog). Алгоритм Верле со скоростями.

Тема 6. Молекулярная динамика различных ансамблей

Моделирование микроканонического ансамбля (NVE - ансамбль). Моделирование при постоянной температуре – канонический ансамбль (NVT - ансамбль). Термостаты Берендсена, Андерсена, Нозе-Гувера. Моделирование при постоянном давлении изобарно-изотермический ансамбль (NPT - ансамбль). Баростат Берендсена, Андерсена. ...

Тема 7. 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 8. Метод Монте-Карло

Статистическое моделирование. История создания метода Монте-Карло (МК). Основы теории вероятности. Этапы моделирования методом МК. Генераторы случайных чисел. Примеры решения задач методом МК: площадь круга, вычисление интеграла, задача о перколяции. Выборка по значимости. Метод Метрополиса. Простейший алгоритм метода МК. Пробные шаги смещения. Различные ансамбли в методе МК: канонический (NVT), микроканонический (NVE), изобарно-изотермический (NPT), изонапряжённый-изотермический, большой канонический ( $\mu$ VТ). ...

## Тема 9. Теория функционала плотности

Уравнение Шредингера многоэлектронных систем. Приближение Хартри-Фока. Обмен и корреляция. Многоэлектронные волновые функции. Система с несколькими степенями свободы – молекула водорода. Точность аппроксимации для многоэлектронных систем. Катастрофа Ван Флека. Метод функционала плотности. Метод Томаса-Ферми. Теоремы Кона-Хюэнберга. Уравнения Кона-Шэма. Локальная аппроксимация плотности (LDA) и обобщённое градиентное разложение (GGA). Метод решения уравнения Кона-Шэма: подход псевдопотенциалов, метод функций Грина, приближение точных МТ-орбиталей. Моделирование твёрдых растворов. Расчёт механических параметров системы.

## 9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится с применением балльно-рейтинговой системы, включающей контроль посещаемости, результаты выполнения заданий на практических занятиях, и фиксируется в форме баллов (нарастающим итогом): посещаемость – максимальный балл 10, выполнение заданий по материалам курса – 40. Контрольная точка проводится не менее одного раза в семестр.

## 10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

**Зачет в шестом семестре** проводится в письменной форме по билетам. Билет содержит три теоретических вопроса и задачу. Продолжительность зачета 1,5 часа.

Примерный перечень теоретических вопросов

1. Модель. Виды моделей. Основные требования, предъявляемые к моделям.
2. Алгоритм Верле.
3. Расчёт внутренней энергии и температуры.

Задача представляет собой объяснение значения команд из скрипта для проведения компьютерного моделирования рассмотренного на практическом занятии из списка, приведённого в разделе 11.

Результаты зачёта определяются оценками «зачтено», «не зачтено».

Итоговая оценка определяется исходя из результатов зачёта и текущей аттестации в течение семестра согласно следующему: 50 или более баллов – «зачтено»; менее 50 баллов – «не зачтено».

**Зачёт с оценкой в восьмом семестре** проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Первая часть содержит три вопроса, проверяющих ИПК-1.2, ИПК-3.1. Ответ на вопросы первой части даётся в развёрнутой форме.

Вторая часть представляет собой задачу из списка, приведённого в разделе 11, проверяющую сформированность компетенции ОПК-3 в соответствии с индикатором ИОПК-3.2. Решение задачи второй части предоставляется в виде текста скрипта.

Примерный перечень теоретических вопросов приведён в разделе 11.

Результаты зачёта определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». Оценка определяется исходя из результатов зачёта и текущей аттестации в течение семестра, и согласуется с принятым соответствием с 5-ти балльной шкалой оценивания: 100-86 – «отлично»; 85-66 – «хорошо»; 65-50 – «удовлетворительно», менее 50 – «неудовлетворительно».

## 11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=29192> и <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=25858>

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

Перечень вопросов, выносимых на экзамен.

1. Модель. Виды моделей. Основные требования, предъявляемые к моделям.
2. Модель многоатомной системы.
3. Парные потенциалы.
4. Трёхчастичное взаимодействие. Многочастичные потенциалы.
5. Модель погруженного атома.
6. Метод молекулярной динамики (микростатистический ансамбль).
7. Алгоритм Верле.
8. Метод чехарды (англ. Leap-Frog).
9. Скоростная форма алгоритма Верле.
10. Термостат Берендсена.
11. Термостат Андерсена.
12. Термостат Нозе-Гувера.
13. Баростат Берендсена.
14. Баростат Андерсена.
15. Расчёт внутренней энергии и температуры.
16. Расчёт давления.
17. Расчёт функций отклика (теплоёмкость, сжимаемость и др.).
18. Определение энтропии и свободной энергии.
19. Радиальная функция распределения.
20. Диффузия (вычислительный эксперимент).
21. Вязкость (вычислительный эксперимент).
22. Метод Монте-Карло (расчёт интеграла, определение площади фигуры).
23. Алгоритм Метрополиса.
24. Функционал электронной плотности. Теоремы Хоэнберга – Кона.
25. Система уравнений Кона – Шэма.
26. Приближение локальной плотности (англ. LDA).
27. Обобщённое градиентное приближение (англ. GGA).

в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.

1. Вводное занятие. Знакомство с программным обеспечением.
2. Моделирование течения жидкости вокруг препятствия
3. Моделирование броуновского движения атомов
4. Моделирование газа, расчёт коэффициента диффузии
5. Моделирование перестройки атомной структуры, применение методов анализа кристаллической решётки
6. Моделирование одноосной деформации, анализ дислокаций
7. Моделирование бикристалла с границей зёрен специального типа
8. Моделирование пластической деформации поликристаллического материала

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:

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

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

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

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

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

– 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.

б) дополнительная литература:

– Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990. – 176 с.

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

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

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

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

– 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.

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

– 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.

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

– 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.

– 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.

в) ресурсы сети Интернет:

– Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000- . – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp?>

– Консультант Плюс [Электронный ресурс]: справ. правовая система. – Электрон. дан. – М., 1992- . – Доступ из локальной сети Науч. б-ки Том. гос. ун-та.

– 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 технологий

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 On-eNote, 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 занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду 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»).

Все виды материально-информационной базы Научной библиотеки ТГУ.

Мультимедийное оборудование физического факультета ТГУ.  
Программное обеспечение курсов, предшествующих изучению представленной дисциплины.

### **15. Информация о разработчиках**

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