

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 22.09.2022 16:12:57  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП



*И.А. Каплунов*  
И.А. Каплунов

«28» июня 2022 г.

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

Моделирование твердотельных систем

Направление подготовки

03.04.03 Радиофизика

Направленность (профиль)

Физика и технология материалов и устройств радиоэлектроники

Для студентов

2 курса, очной формы обучения

Составитель: д.ф.-м.н., профессор Самсонов В.М.

*Самсонов*

Тверь, 2022

## **I. Аннотация**

### **1. Цель и задачи дисциплины**

Целью освоения дисциплины является знакомство с современными методами компьютерного моделирования, включая первопринципное и атомистическое моделирование, прежде всего, методы Монте-Карло и молекулярной динамики, овладение базовыми навыками реализации указанных методов применительно к исследованию кристаллических и аморфных твердых тел, в также твердых наночастиц и твердотельных наносистем.

Задачами освоения дисциплины являются:

- знакомство с основами методов моделирования и разновидностями моделирования, отвечающими различным уровнем имитации исследуемой системы: уровню электронной структуры, атомистическому уровню, континуальному уровню;
- изучение основ методов статистического и детерминистического моделирования (Монте-Карло и молекулярная динамика);
- знакомство с программами, предназначенными для моделирования наносистем и выполнение заданий, связанных с использованием этих программ.
- Освоение некоторых программ для обработки результатов атомистического моделирования.

### **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Дисциплина Моделирование твердотельных систем относится к Блоку 1. дисциплин обязательной части учебного плана.

Методы и методология моделирования, включая компьютерное моделирование, все шире используются в науке и технике, в том числе в гуманитарных науках. В рамках данного спецкурса рассматриваются базовые понятия теории моделирования (оригинал, модель, упрощенная модель, гомоморфная модель и др.). Эти понятия изучаются на серьезном научном уровне в кибернетике, т.е. науке об управлении в сложных системах. Изучение этих

вопросов имеет большое значение для формирования у студентов методологии современного научного исследования, а также для формирования у них научного мировоззрения. Помимо базовых понятий и концепций излагаются основы двух, наиболее широко применяющихся подходов к моделированию атомно-молекулярных систем – атомистического и первопринципного моделирования, а также двух основных методов атомистического моделирования: методов Монте-Карло и молекулярной динамики.

Данный курс тесно связан с разделами «Квантовая механика», «Термодинамика и статистическая физика» курса теоретической физики, а также с рядом спецкурсов, связанных с физикой конденсированного состояния вещества и кристаллографией.

Освоение дисциплины будет востребовано при выполнении научно-исследовательской работы и прохождении ознакомительной и преддипломной практики.

Для успешного освоения курса достаточно знаний и навыков, сформированных в бакалавриате при изучении курсов общей и теоретической физики. Будет также предусмотрена возможность успешного освоения курса лицами с техническим образованием.

**3. Объем дисциплины:** 4 зачетных единицы, 144 академических часа, в том числе:

**контактная аудиторная работа:** лекции 26 часов;

**самостоятельная работа:** 118 час, в том числе контроль 27 часов.

**4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

<i>Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)</i>	<i>Планируемые результаты обучения по дисциплине</i>
УК-2.Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	УК-2.2. Разрабатывает концепцию проекта в рамках обозначенной проблемы: формулирует цель, задачи, обосновывает актуальность,

	<p>значимость, ожидаемые результаты и возможные сферы их применения;</p> <p>УК-2.4. Осуществляет мониторинг хода реализации проекта, корректирует отклонения, вносит дополнительные изменения в план реализации проекта, уточняет зоны ответственности участников проекта.</p>
<p>ОПК-1. Способен применять фундаментальные знания в области физики и радиофизики для решения научно-исследовательских задач, в том числе в сфере педагогической деятельности</p>	<p>ОПК-1.1. Формулирует самостоятельно научно-исследовательскую задачу и планирует этапы ее выполнения, опираясь на фундаментальные знания в области физики и радиофизики;</p> <p>ОПК-1.2. Выполняет постановку эксперимента и/или построение алгоритма для моделирования физических процессов в рамках реализации научно-исследовательских задач</p>
<p>ОПК-3. Способен применять современные информационные технологии, использовать компьютерные сети и программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.</p>	<p>ОПК-3.2. Применяет современные программные продукты для анализа и обработки результатов научной деятельности.</p>

## **5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения**

Экзамен в 3 семестре.

**6. Язык преподавания:** русский.

**II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.**

**1. Для студентов очной формы обучения**

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа, в том числе Контроль (час.)
		Лекции	В т.ч. ПП	
1. Введение	2	2		0
2. Теоретические основы моделирования.	2	2		0
3. Основы физического моделирования.	5	4		1
4. Основы статистического моделирования	16	2		14
5. Метод Монте-Карло в физике конденсированного состояния	32	4		28
6. Метод молекулярной динамики.	58	8		50
7. Основы первопринципного моделирования.	29	4		25
Экзамен	27			27
<b>ИТОГО</b>	<b>144</b>	<b>26</b>		<b>91</b>

**Содержание тем (расшифровка разделов)**

**1. Введение**

Место моделирования в методологии научного творчества. Связь моделирования с вычислительным экспериментом. Классификация методов моделирования: математическое и физическое моделирование и их взаимосвязь. Два случая математического описания систем. Понятие о кибернетике как науке, об управлении в сложных системах и её место в теории моделирования. Принцип изоморфности математических моделей различным физическим явлениям. Примеры: перенос импульса, перенос тепла, перенос массы, перенос заряда. Классификация математических моделей: жесткие (детерминированные модели), вероятностные модели (метод Монте-Карло). Методы моделирования в естественных и гуманитарных науках.

## **2. Теоретические основы моделирования.**

Обобщенное понимание движения в кибернетике. Состояние системы. Пространство состояний. Параметры состояний (координаты системы). Понятие о фазовом пространстве. Примеры движения: механическое движение, изменение сырьевых запасов, изменение суммы на банковском счете. Оригинал и модель. Примеры сходства (подобия): внешнее сходство, сходство структуры, сходство поведения. «Черный ящик». Понятие об изоморфных системах. Упрощенная модель. Системы-аналоги. Аналоговые вычислительные машины и устройства. Общий подход к разработке конкретных моделей, многоступенчатый подход: описание исходной системы и выделение основных параметров (оригинал), построение физической модели, формулировка замкнутой математической модели, построение алгоритмической модели, численная модель, программирование, отладка и проверка с уточнением всех уровней описания.

## **3. Основы физического моделирования.**

Теория подобия как теоретическая основа физического моделирования. Критерии подобия и их соотношения. Теорема подобия: необходимое условие подобия, достаточное условие подобия, П-теорема Букингама. Проблемы устойчивости физических моделей. Примеры.

## **4. Основы статистического моделирования (метода Монте-Карло).**

Теоретические основы метода Монте-Карло. Понятие о генераторе псевдослучайных чисел. Равномерное распределение последовательности случайных величин. Простейшие задачи статистического моделирования. Метод Монте-Карло в вычислительной математике, расчет определенного интеграла по методу Монте-Карло. Пример вычисления вириальных коэффициентов высших порядков.

## **5. Метод Монте-Карло в статистической физике.**

Краткие сведения о методе ансамблей Гиббса. Основные статистические ансамбли. Принципиальная схема расчета канонических средних величин по методу Монте-Карло. Схема Метрополиса. Марковские цепи. Периодические граничные условия. Возможности метода Монте-Карло.

## 6. Метод молекулярной динамики.

Понятие о применении метода молекулярной динамики в теории жидкостей, физике твердого тела и физике наносистем. Теоретические основы методов классической и квантовой молекулярной динамики. Два варианта молекулярной динамики (адиабатическая и изотермическая молекулярная динамика). Современное состояние атомистического моделирования в области моделирования малых объектов и макроскопических систем. Эквивалентность методов Монте-Карло и молекулярной динамики. Эргодическая теорема.

## 7. Основы первопринципного моделирования.

Различные алгоритмы моделирования из первых принципов. Метод функционала электронной плотности и его применение в физике твердого тела и физике малых объектов.

## III. Образовательные технологии

Учебная программах-наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
1. Введение	Лекции	1.Изложение теоретического материала (презентация) 2.Решение задач 3.Самостоятельное изучение теоретического материала 4. Решение индивидуальных задач
2. Теоретические основы моделирования.	Лекции	1.Изложение теоретического материала (презентация) 2.Решение задач 3.Самостоятельное изучение теоретического материала 4. Решение индивидуальных задач
3. Основы физического моделирования.	Лекции	1. Изложение теоретического материала (презентация) 2.Решение задач 3.Самостоятельное изучение теоретического материала 4. Решение индивидуальных задач
4. Основы статистического моделирования	Лекции	1.Изложение теоретического материала (презентация) 2.Решение задач 3.Самостоятельное изучение теоретического материала

		4. Групповое решение задач. 5. Решение индивидуальных задач 6. Информационные (цифровые) 7. Игровые технологии
5. Метод Монте-Карло в физике конденсированного состояния	Лекции	1. Изложение теоретического материала (презентация) 2. Решение задач 3. Самостоятельное изучение теоретического материала 4. Групповое решение задач. 5. Решение индивидуальных задач 6. Информационные (цифровые) 7. Игровые технологии
6. Метод молекулярной динамики.	Лекции	1. Изложение теоретического материала (презентация) 2. Решение задач 3. Самостоятельное изучение теоретического материала 4. Групповое решение задач. 5. Решение индивидуальных задач 6. Информационные (цифровые) 7. Игровые технологии
7. Основы первопринципного моделирования.	Лекции	1. Изложение теоретического материала (презентация) 2. Решение задач 3. Самостоятельное изучение теоретического материала 4. Групповое решение задач. 5. Решение индивидуальных задач 6. Информационные (цифровые) 7. Игровые технологии

#### **IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации**

*Форма проведения промежуточного контроля:* студенты, освоившие программу курса «Моделирование твердотельных систем» могут сдать экзамен по итогам семестровой аттестации согласно «Положению о промежуточной аттестации (экзаменах и зачетах) обучающихся по программам высшего образования ТвГУ» (протокол №11 от 28 апреля 2021 г.).

##### **1. Текущий контроль успеваемости**

##### **ОПК-1**



## Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:

1. Метод Монте-Карло: основа метода и его приложения.
2. Схема Метрополиса.
3. Метод молекулярной динамики.
4. Изобразите граф, демонстрирующий жизненный цикл однолетнего растения.

## Задачи для проверки умений при освоении дисциплины

### Задание №1.

Исследовать поведение механической системы Гамильтониан которой задан следующей функцией  $H=1/2(px^2+py^2)+V(x,y)$ , дополнительно предполагается  $m=1, E<0$ :

a) гармонический потенциал:  $V(x,y) = 1/2 (\omega_x x^2 + \omega_y y^2)$ ;

b) возмущенный гармонический потенциал  $V(x,y) = 1/2 (x^2 + y^2) + x^2y - 1/3 y^2$ .

Определить границы области движения в зависимости от начальной энергии системы (ограниченное и не ограниченное движение). Значения  $w_1$  и  $w_2$ ,  $r(0)$  и  $v(0)$  являются параметрами задачи и задаются из вне. В качестве отчета представить графики поведения закона движения  $r(t)$  в зависимости от  $E_0$ .

### Задание №2

С помощью метода Монте-Карло вычислить третий и четвертый коэффициенты вириального разложения в случае потенциала твердых сфер. Реализовать процедуру вычисления этих коэффициентов методом Симпсона. Исследовать зависимость точности и скорости вычисления в зависимости от числа шагов

интегрирования. Сделать заключения о случаях целесообразности использования первого и второго метода.

### **ОПК-3**

#### **Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:**

1. Применение метода Монте-Карло в радиофизике и электронике.
2. Применение метода молекулярной динамики к моделированию полупроводниковых материалов.

#### **Задачи для проверки умений при освоении дисциплины**

##### ***Задание №1***

В пакете HyperChem построить наиболее энергетически выгодные конфигурации кластеров атомов аргона образованных из 13, 55, 92 и 147 частиц. Методом Монте-Карло минимизировать энергии кластеров при  $T=1\text{K}$ . Описать полученные структуры. Оформление отчета.

##### ***Задание №2***

Исследовать структурные переходы в нанокластерах  $13\text{Ar}$ ,  $55\text{Ar}$ ,  $92\text{Ar}$  в зависимости от температуры системы методом молекулярной динамики. Описать влияние числа частиц на температуру плавления и испарения нанокластеров. Повторить расчеты методом Монте-Карло. Сделать выводы о разнице температур переходов даваемых двумя методами. Оформление отчета.

## **2. Промежуточная аттестация**

### **ОПК-1**

#### **Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:**

1. Интеграл состояний, конфигурационный интеграл, уравнение состояния.

2. Уравнение состояния и вириальное разложение
3. Большой канонический ансамбль, большое каноническое распределение.
4. Межмолекулярные силы. Понятие о химической и водородной связях
5. Модельные потенциалы: потенциал жестких сфер, потенциал Леонарда-Джонса, Сазерленда, Штокмайера. Аддитивность ван-дер-ваальсовских сил.
6. Групповое разложение (метод Майера).
7. Теория подобия и закон соответственных состояний.
8. Приведенное уравнение состояний. Термодинамическое подобие.
9. Уравнение Ван-дер-Ваальса.

#### **Задачи для проверки умений при освоении дисциплины**

1. Разработать алгоритм и компьютерную программу для нахождения одномерного определенного интеграла по методу Монте-Карло.
2. Найти  $\int_0^{\pi/2} \cos\theta d\theta$  аналитически и численно с помощью метода Монте-Карло. Сравнить результаты.
3. Провести тестирование генератора псевдослучайных чисел.

#### **ОПК-3**

#### **Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:**

1. Особенности жидкого состояния вещества. Развитие теории жидкостей, понятие о ближнем и дальнем порядке, радиальная функция распределения. Парная корреляционная функция.
2. Молекулярные функции распределения. Определение радиальной функции из экспериментальных данных по рассеянию рентгеновских лучей.

3. Коррелятивные функции, младшие коррелятивные функции, их применение к расчету внутренней энергии системы.
4. Среднее значение величин аддитивного и бинарного типов. Флуктуация числа частиц в жидкостях. Давление в жидкости (уравнение состояния).
5. Цепочка интегро-дифференциальных уравнений Боголюбова, решение цепочки Боголюбова для газа.
6. Суперпозиционное приближение. Уравнение Боголюбова для радиальной функции.
7. Метод Монте-Карло, основные принципы.
8. Метод молекулярной динамики. Уравнение Ланжевена.
9. Гипотеза эргодичности. Равномерное распределение последовательности случайных величин. Схема Метрополиса.
10. Принципиальная схема расчета средних величин в методе Монте-Карло и вдоль фазовых траекторий в методе молекулярной динамики.

Возможности метода Молекулярной динамики и метода Монте-Карло.

### **Задачи для проверки умений при освоении дисциплины**

Задача 1. У сборщика деталей 50% деталей (валов) имеют диаметр  $d$  больше номинала ( $d > d_{\text{ном}}$ ) и 50% меньше номинала ( $d < d_{\text{ном}}$ ). В изделии устанавливается 3 детали (вала). Функционирование нарушится, если в одном изделии окажутся 3 детали с положительным отклонением от номинала. Какова вероятность сборки нормально функционирующего механизма?

Задача 2. Разработать компьютерную программу для реализации представленного ниже алгоритма генератора псевдослучайных чисел.

Во всех основных алгоритмических языках имеется стандартная функция  $Y = \text{RND}(X)$  или  $\text{RANDOM}(X)$ , которая используется в качестве датчика случайных чисел (точнее псевдослучайных). Обычно  $x=1$ , т.е.  $Y \in [0,1]$ .

Простой итерационный алгоритм

$$X_{n+1} = (a * X_n + b) \bmod m$$

$$Y_{n+1} = X_{n+1} / m$$

Здесь  $m = 2^k + 1$  ( $k = 15$  или  $31$ );

$a, b, X_0$  – целые числа из диапазона  $[0, m - 1]$ . Выбор параметров  $a, b, X_0$  влияет на длину отрезка аперидичности генерируемых псевдослучайных чисел.

*Пример:*  $k = 3$ ,  $m = 2^3 + 1 = 9$ ,  $m - 1 = 8$

$$a = 7, b = 8, X_0 = 6$$

$$X_1 = (7 * 6 + 8) \bmod 9 = 5; Y_1 = 5/9 = 0.56$$

$$X_2 = (7 * 5 + 8) \bmod 9 = 43 \bmod 9 = 7$$

$$X_3 = 57 \bmod 9 = 3; Y_3 = 0.33; Y_2 = 0.78$$

## **УК-2**

Индивидуальное задание по атомистическому моделированию твердотельной системы или малого объекта с использованием либо программы LAMMPS (Sandia National Laboratories, USA), либо компьютерной программы, разработанной под руководством и при участии преподавателя.

### **V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

#### **а) основная литература:**

1. Полухин В.А., Ватолин Н.А. Моделирование разупорядоченных и наноструктурированных фаз. Екатеринбург: Институт металлургии УРО РАН, 2011. 461 с. (9 экз. в библиотеке ТвГУ);
2. [Боев В.Д.](#), [Сыпченко Р.П.](#) Компьютерное моделирование. 2010. // <http://www.intuit.ru/department/calculate/compmodel/1/>

**б) дополнительная литература:**

1. Полухин В.А. Моделирование наноструктур и прекурсионных состояний. Екатеринбург: Институт металлургии УРО РАН, 2004. 208 с.
2. Ширванянц Д.Г., Халатур П.Г. Компьютерное моделирование полимеров. Учебное пособие. Тверь, 2000. 157 с.
3. Роулинсон Дж., Уидом Б. Молекулярная теория капиллярности. М.: Мир, 1986.
4. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики и физической химии. М.: Высшая школа 1984.
5. Крокстон К. Физика жидкого состояния – статистическое введение. М.: Мир, 1978.
6. Физика простых жидкостей (под редакцией Тиммерли, Роулинсона Д. и Дж. Рошбука), М.: Мир, 1971.
7. Фишер И.З. Статистическая теория жидкостей. М.: Наука, 1961.
8. Гиршфельдер Д., Кертисс И., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1961.
9. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. М.: Изд-во АН СССР, 1959.
10. Хилл Т. Статистическая механика. М.: ИЛ, 1950.

**2) Программное обеспечение**

#### а) Лицензионное программное обеспечение

Для выполнения практических заданий студентам рекомендуется самостоятельно выбрать привычную для них среду разработки программ. В качестве таковых студенты могут использовать среду разработки Delphi или Builder. В этом случае для визуализации вычислений студенты могут использовать пакет математической графики Origin.

С целью экономии времени студентам рекомендуется использовать математические пакеты Maple и Mathcad. Благодаря мощной интеллектуальной среде программирования студенты могут полностью сосредоточиться на разработке и исследовании математических моделей, минуя этап написания вспомогательных подпрограмм по дифференцированию интегрированию и т.д. Для быстрой выработки необходимых навыков использования этих пакетов к данному методическому комплексу прилагаются электронные учебники по данным пакетам.

Имеются также профессиональные компьютерные программы для атомистического моделирования твердотельных систем (LAMMPS) и обработки результатов компьютерных экспериментов (OVITO).

#### б) Свободно распространяемое программное обеспечение

#### 3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. ЭБС «ZNANIUM.COM» [www.znanium.com](http://www.znanium.com);

2. ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <https://biblioclub.ru/>;

3. ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com>

4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

## **VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины**

Имеются описания компьютерных программ для атомистического моделирования.

## **VII. Материально-техническое обеспечение**

<b>Наименование специальных* помещений</b>	<b>Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы</b>	<b>Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа</b>
Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, Лекционная аудитория № 228 (170002 Тверская обл., г. Тверь, Садовый пер., д. 35)	1. Мультимедийный проектор Casio XJ-N2650 с потол. крепл. 2. Экран Screen Media 3. Ноутбук (переносной) 4. Комплект учебной мебели на 68 посадочных мест 5. Меловая доска	Microsoft Windows 10 Enterprise - Акт на передачу прав №785 от 06.08.2021 г. MS Office 365 pro plus - Акт на передачу прав №1051 от 05.08.2020 г. Kaspersky Endpoint Security для Windows - Акт на передачу прав №1842 30.11.2020 Архиватор 7-Zip - бесплатно Acrobat Reader DC - бесплатно Google Chrome – бесплатно Unreal Commander - бесплатно Почта Outlook - бесплатно

Для проведения поточных лекций и семинаров в аудитории имеется кодоскоп для демонстрации слайдов, мультимедийная техника (DLP проектор для демонстрации презентаций и учебных фильмов) и компьютеры для обеспечения работы мультимедийной техники и доступа к сети Интернет.

Имеется 5 современных компьютеров, включая компьютеры, оснащенные графическими процессорами, позволяющие осуществлять высокопроизводительные параллельные вычисления.



### **VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины**

№ п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.			
2.			