

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики
А.С. Батурин**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Вычислительные методы исследований микроструктуры твердых тел
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 15 час.

лабораторные занятия: 15 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составили:

В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент

А.С. Антропов, ассистент

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 03.03.2023

Аннотация

Курс позволяет научиться самостоятельно выбирать и реализовывать наиболее эффективные методы атомистического моделирования различных свойств веществ в твердой фазе, учитывая при выборе метода особенности конкретной задачи, а также правильно интерпретировать результаты расчетов.

В результате освоения курса произойдет ознакомление обучающихся с различными методами расчета свойств идеальных кристаллических решеток, точечных и протяженных дефектов, поверхностей на основе атомистического моделирования. Выработка понимания преимуществ, недостатков и области применимости каждого метода.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

По результатам курса обучающиеся должны уметь самостоятельно выбирать и реализовывать наиболее эффективные методы атомистического моделирования различных свойств веществ в твердой фазе, учитывая при выборе метода особенности конкретной задачи, а также правильно интерпретировать результаты расчетов.

Задачи дисциплины

Ознакомление обучающихся с различными методами расчета свойств идеальных кристаллических решеток, точечных и протяженных дефектов, поверхностей на основе атомистического моделирования. Выработка понимания преимуществ, недостатков и области применимости каждого метода.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- теоретические основания различных методов: расчета фононных спектров и дисперсионных кривых, расчета энергий образования и миграции дефектов, в том числе на поверхности, коэффициентов диффузии примесей, коэффициента самодиффузии в твердых телах (в том числе по поверхности), расчета энергий образования и мобильности дислокаций, расчета химического потенциала атомов в газовой и конденсированной фазе, расчета энергий образования и подвижности объемных включений в твердых телах.

уметь:

- реализовывать упомянутые выше методы расчета с использованием языков программирования или существующих пакетов для атомистического моделирования;
- находить теоретически или путем тестов оптимальные параметры моделирования;
- правильно интерпретировать результаты расчетов и находить искомые физические свойства моделируемого материала.

владеть:

- практическими навыками использования упомянутых выше методов;
- теоретическим аппаратом, позволяющим при необходимости вносить коррективы в изученные методы под конкретную задачу.

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

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Плотность фононных состояний		1	1	6
2	Дисперсионные кривые		1	1	6
3	Конфигурационная и колебательная энтропия решетки		1	1	6
4	Образование точечных дефектов		2	2	6
5	Миграция точечных дефектов		2	2	6
6	Поверхность и дефекты на ней		2	2	6
7	Методы расчета химического потенциала		2	2	6
8	Дислокации		2	2	6
9	Подвижность дислокаций. Сдвиговое напряжение. Скорость движения		1	1	6
10	Объемные включения в кристаллической решетке		1	1	6
Итого часов			15	15	60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 2 (Весенний)

1. Плотность фононных состояний

Гармоническое приближение кристаллической решетки. Ангармонизм. Фононы с точки зрения классической механики и квантовой механики. Фононный спектр. Динамическая матрица системы. Фононы, как собственные вектора динамической матрицы. Влияние периодических граничных условий на фононный спектр. Ограничения метода динамической матрицы.

Автокорреляционная функция скорости (АКФС). Фононный спектр как преобразование Фурье автокорреляционной функции скорости. Влияние параметров расчета АКФС на спектр. Релаксация системы. Особенности реализации расчета АКФС в пакете LAMMPS.

2. Дисперсионные кривые

Расчет частоты колебаний для определенного волнового вектора. Продольные и поперечные фононы. Оптические и акустические фононы. Дисперсионные кривые. Точки в k-пространстве. Метод Конга для нахождения динамической матрицы системы из результатов МД. Влияние параметров расчета на точность динамической матрицы.

Особенности реализации расчета дисперсионных кривых в пакете LAMMPS.

3. Конфигурационная и колебательная энтропия решетки

Размещение атомов по узлам решетки как микросостояние системы. Конфигурационная энтропия. Выражение конфигурационной энтропии через концентрацию дефектов.

Распределение энергии по колебательным степеням свободы как микросостояние системы. Колебательная энтропия. Формула для колебательной энтропии канонического ансамбля. Кинетический смысл колебательной энтропии. Частота колебаний как частота попыток преодолеть барьер. Сравнение изменения колебательной и конфигурационной энтропии при создании дефекта для микроскопических и макроскопических систем.

Расчет колебательной энтропии через фононный спектр. Особенности реализации расчета колебательной энтропии в МД моделировании.

4. Образование точечных дефектов

Вакансии, междоузлия, пары Френкеля, дефекты Шотки, атомы замещения, антисайт дефекты. Свободная энергия Гиббса кристаллической решетки с дефектами. Концентрация дефектов в зависимости от свободной энергии образования дефекта. Концентрация пар Френкеля.

Кинетический подход к расчету концентрации дефектов. Образование и исчезновение вакансий и междоузлий, как равновесие с поверхностью. Образование пар Френкеля как равновесие в объеме. Зависимость концентрации дефектов от расстояния до поверхности.

Энтальпия образования дефекта: зависимость упругой энергии дефекта от давления и работа по изменению объема кристалла. Зависимость энтальпии образования различных дефектов от давления при различных граничных условиях.

Статический метод расчета энергии образования дефекта. Референсное состояние, определяемое задачей, химический потенциал. МД метод расчета концентрации дефекта. Особенности реализации расчета концентрации в МД моделировании для различных задач. Моделирование с открытой поверхностью, зависимость от размера системы.

5. Миграция точечных дефектов

Путь миграции, седловая точка. Закон Аррениуса. Предэкспоненциальный фактор, закон Вайнъярда, связь с фононными спектрами. Метод упругой ленты. Влияние размеров системы на результат.

Коэффициент диффузии и самодиффузии. Методы МД расчета миграции дефектов. Ускорение миграции дефекта в МД расчете путем изменения потенциальной ямы.

6. Поверхность и дефекты на ней

Энергия поверхности, разрыв связей, колебательная энтропия поверхности. Адаптомы, поверхностные вакансии и поверхностные междоузлия. Горизонтальные связи, ровные и шероховатые поверхности. Террасы и ступени. Теория роста кристалла. Равновесная форма кристалла.

Особенности реализации расчета энергий образования и миграции поверхностных дефектов. Ориентация расчетной ячейки, граничные условия, размеры ячейки.

7. Методы расчета химического потенциала

Межфазная граница. Метод термодинамического интегрирования. Метод добавления/удаления частицы. Метод Видома. Особенности реализации данных методов в МД моделировании.

8. Дислокации

Краевые и винтовые дислокации. Вектор Бюргерса. Механизм рождения дислокаций. Механизм движения дислокаций. Упругие напряжения, создаваемые протяженным дефектом. Притяжение точечных дефектов и дислокаций.

9. Подвижность дислокаций. Сдвиговое напряжение. Скорость движения

Применение неравновесного МД расчета для моделирования динамики дислокаций. Граничные условия, предельные силы. Термостатирование при неравновесном расчете. Анализ дислокаций в пакете OVITO. Особенности реализации расчета динамики дислокаций в пакете LAMMPS.

10. Объемные включения в кристаллической решетке

Движение объемных дефектов как самодиффузия в решетке, объемный и поверхностный механизмы. Фасеточные структуры, механизм нуклеации террас на фасетках. Упругие напряжения, создаваемые включениями. Образование газовых пор в облученных материалах. Механизм миграция-коалесценция и механизм «созревания по Оствальду». Модели фазового поля (phase-field models). Особенности МД расчета параметров упомянутых механизмов.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, оснащенная доской, мультимедийным проектором и экраном.
У всех студентов должен быть доступ к персональному компьютеру.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель, Пер. с англ. Физматгиз, 1963.
2. Статистическая термодинамика / Ч. Киттель, 1977.
3. Теоретическая физика. Том V. Статистическая физика, часть 1. книга / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, 1976 .
4. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем / Д. Френкель, Б. Смит

Дополнительная литература

1. Noirot L. A method to calculate equilibrium concentrations of gas and defects in the vicinity of an over-pressured bubble in UO₂ // Journal of Nuclear Materials. 2014. Vol. 447, no. 1-3. P. 166–178.
2. Burton W.-K., Cabrera N., Frank F. The growth of crystals and the equilibrium structure of their surfaces // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. 1951. Vol. 243, no. 866. P. 299–358.
3. Wulff G. Some theorems concerning the growth and dissolution rates of crystals // Z. Kristallogr. 1901. Vol. 34. P. 449–530.
4. Nazarov A., Mikheev A. Diffusion under a stress in fcc and bcc metals // Journal of Physics: Condensed Matter. 2008. Vol. 20, no. 48. P. 485203.
5. Antropov A. S., Fidanyan K. S., Stegailov V. V. "Phonon density of states for solid uranium: accuracy of the embedded atom model classical interatomic potential". Journal of Physics: Conference Series 946 (2018): 012094.
6. Shackelford J. F. Introduction to materials science for engineers. – Upper Saddle River : Pearson, 2016. – С. 687.
7. Fultz B. Vibrational thermodynamics of materials //Progress in Materials Science. – 2010. – Т. 55. – №. 4. – С. 247-352.
8. Tilley R. J. D. Defects in solids. – John Wiley & Sons, 2008.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

LAMMPS Documentation (<https://docs.lammps.org/Manual.html>)

Научная электронная библиотека РФФИ www.elibrary.ru

Единое окно доступа к образовательным ресурсам Федерального портала Российское образование <http://www.window.edu.ru>

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Для занятий может потребоваться следующее программное обеспечение:

Интернет-браузер, MS Word, MS Power Point, Adobe Reader, Anaconda Python distribution, LAMMPS, OVITO.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Дифференцированный зачет

Разработчики:

В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент
А.С. Антропов, ассистент

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Вычислительные методы исследований микроструктуры твердых тел» обучающийся должен:

знать:

- теоретические основания различных методов: расчета фононных спектров и дисперсионных кривых, расчета энергий образования и миграции дефектов, в том числе на поверхности, коэффициентов диффузии примесей, коэффициента самодиффузии в твердых телах (в том числе по поверхности), расчета энергий образования и подвижности дислокаций, расчета химического потенциала атомов в газовой и конденсированной фазе, расчета энергий образования и подвижности объемных включений в твердых телах.

уметь:

- реализовывать упомянутые выше методы расчета с использованием языков программирования или существующих пакетов для атомистического моделирования;
- находить теоретически или путем тестов оптимальные параметры моделирования;
- правильно интерпретировать результаты расчетов и находить искомые физические свойства моделируемого материала.

владеть:

- практическими навыками использования упомянутых выше методов;
- теоретическим аппаратом, позволяющим при необходимости вносить коррективы в изученные методы под конкретную задачу.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлого занятия.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

1. Рассчитать фононный спектр однокомпонентного металла методом автокорреляционной функции скорости
2. Рассчитать фононный спектр однокомпонентного металла методом Конга с помощью модуля PHONON в LAMMPS
3. Построить дисперсионные кривые однокомпонентного металла методом Конга с помощью модуля PHONON в LAMMPS
4. Рассчитать потенциальные энергии образования вакансий и междоузлий в данном материале при нулевой температуре. Построить зависимость этой энергии от давления.
5. Рассчитать концентрации дефектов в МД моделировании при конечной температуре, соответствующие заданному типу кинетического равновесия (в объеме или с поверхностью)
6. Рассчитать колебательную энтропию дефекта по фононному спектру идеальной структуры и структуры с дефектом
7. Рассчитать энергию миграции данного дефекта методом упругой ленты
8. Рассчитать коэффициент диффузии дефекта из конечно-температурного МД расчета.
9. Рассчитать энергию образования поверхности
10. Рассчитать скорость движения дислокации при сдвиговом напряжении

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Оценка (дифференцированный зачет) выставляется за выполнение и сдачу всех домашних заданий по указанным вопросам (среднее арифметическое).