

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

**УТВЕРЖДЕНО**

**и.о. директора физтех-школы  
физики и исследований им.  
Ландау**

**А.А. Воронов**

**Рабочая программа дисциплины (модуля)**

<b>по дисциплине:</b>	Теоретические основы атомной динамики и моделирования микроструктуры многокомпонентных конденсированных сред
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Суперкомпьютерное моделирование ядерных процессов и технологий Физтех-школа природоподобных, плазменных и ядерных технологий им. И.В. Курчатова кафедра моделирования ядерных процессов и технологий
<b>курс:</b>	4
<b>квалификация:</b>	бакалавр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

7 (осенний) - Экзамен

8 (весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 60 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Подготовка к экзамену: 60 час.

Всего часов: 180, всего зач. ед.: 4

Программу составил: Е.И. Уксусов, канд. техн. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры моделирования ядерных процессов и технологий 18.05.2020

## Аннотация

Студенты, изучающие курс «Теоретические основы атомной динамики моделирования микроструктуры многокомпонентных конденсированных сред», должны овладеть общим понятийным аппаратом и научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен иметь основные представления о физических процессах проходящих в системах конденсированных сред. Владеть аппаратом фейнмановских диаграмм. Показателем владения материалом служит умение решать задачи и ориентироваться в круге вопросов, связанных с проблемами анализа физики конденсированных сред для ядерных. Для формирования умения применять теоретические знания на практике студенту необходимо применять программные системы, разработанные на основе методов молекулярной динамики.

### 1. Цели и задачи

#### Цель дисциплины

- изложение аналитических и численных методов исследования микроструктуры и атомной динамики конденсированных сред;
- изложение метода функции Грина;
- обучение навыкам компьютерного моделирования методами молекулярной динамики и статистической геометрии;
- изложение формализма фейнмановских диаграмм.

#### Задачи дисциплины

- формирование базовых знаний в области атомной динамики конденсированных сред;
- обучение студентов основным методам и подходам, используемым в атомной динамике конденсированных сред, изучение базовых принципов методов молекулярной динамики;
- формирование подходов, основанных на математическом моделировании, методах молекулярной динамики.

### 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Способен применять фундаментальные знания, полученные в области физико-математических и (или) естественных наук, и использовать их в профессиональной деятельности	ОПК-1.1 Способен анализировать поставленную задачу, намечать пути ее решения
	ОПК-1.2 Способен строить математические модели, производить количественные расчеты и оценки
	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
ОПК-2 Способен использовать современные информационные технологии и программные средства при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности	ОПК-2.2 Знает и умеет применять численные математические методы и прикладное программное обеспечение для решения научных задач в профессиональной области
ОПК-5 Способен участвовать в проведении фундаментальных и прикладных исследований и разработок, самостоятельно осваивать новые теоретические, в том числе, математические методы исследований, и работать на современной экспериментальной научно-исследовательской, измерительно-аналитической и технологической аппаратуре	ОПК-5.1 Способен решать поставленные задачи в области теоретических и экспериментальных исследований и разработок
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем

(аналитические и имитационные)  
исследования

ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- принципы и методы молекулярной динамики, методов исследования физики конденсированных сред.

уметь:

- применять подходы молекулярной динамики для исследований в задачах ядерных технологий.

владеть:

- методами компьютерного моделирования и молекулярной динамики, методами разработки проблемно-моделирующих сред на современных суперкомпьютерных системах.

### 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	Микроскопические методы исследования.	30			30
2	Конденсированные среды на микроуровне.	15			15
3	Флуктуации плотности конденсированной среды топологического и композиционного порядка.	15			15
Итого часов		60			60
Подготовка к экзамену		60 час.			
Общая трудоёмкость		180 час., 4 зач.ед.			

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

Семестр: 7 (Осенний)

##### 1. Микроскопические методы исследования.

Метод функции Грина.

Потенциал Ландау, введение в двухпараметрическую флуктуационную теорию фазовых переходов, функционал топологического и композиционного порядков, приближение теории возмущений, преобразование потенциала Ландау в гамильтониан слабо взаимодействующих фононных и ликвонных полей и построение их функций Грина.

Компьютерное моделирование методами молекулярной динамики и статистической геометрии.

Численное моделирование конденсированных сред методом молекулярной динамики (МД), разновидности парных потенциалов взаимодействия частиц, NVE и NVT ансамбли, кубические ячейки с периодическими граничными условиями, техника «обрезания» парных потенциалов, корреляционные функции, кинетические характеристики систем, топология микроструктуры «мгновенных снимков» МД ячейки, атомные конфигурации и симплициальные подразделения флуктуаций плотности, тетраэдрические кластеры плотной части среды.

Верификация моделей методом рассеяния ультра холодных нейтронов.

Проверка МД моделей методами рассеяния коротковолнового излучения (нейтроны, электроны, рентгеновское излучение), спектрометры рассеянных ультра холодных нейтронов, дифференциальные сечения рассеяния, структурные факторы, коллективные и индивидуальные движения, спектры элементарных возбуждений, композиционная кластеризация.

## Семестр: 8 (Весенний)

### 2. Конденсированные среды на микроуровне.

Тетраэдрическая модель флуктуаций плотности.

Коррелятор флуктуаций плотности, масштабное самоподобие, особенности топология конденсированных сред, тетраэдрические цепи Бернала, матричная алгебра построения цепей, операторы поворота, инверсия цепей, поверхностный фрактал флуктуаций плотности среды в МД модели и в экспериментах по малоугловому рассеянию нейтронов.

Топологическая структура флуктуаций плотности конденсированной среды.

Мощность и связность тетраэдрических кластеров флуктуаций плотности, гистограммы двухпараметрического распределения флуктуаций плотности в кристалле, аморфном теле и жидкости, текучесть жидкости, канонические поры Бернала, их симплициальное подразделение, топологический образ конденсированной среды в правильном симплициальном подразделении, число d-мерных симплексов в полиэдрах и регулярных решетках.

Генетический код флуктуаций плотности конденсированной среды.

Генетическая структура инверсионно-сопряженных цепей Бернала, двойные тетраэдрические спирали в жидких металлах, расшифровка генетического кода тетраэдрических кластеров.

Особенности атомной динамики оксидного топлива.

Твердое тело под облучением, температурные области устойчивых структур, радиационно-индуцированные структурные переходы, радиационная релаксация фаз, атомная динамика твердых соединений, диспропорционирование заряда ионного остова нестехиометрических фаз, «плавление» кислородной подрешетки диоксида урана, допированное стекло-образование диоксида.

### 3. Флуктуации плотности конденсированной среды топологического и композиционного порядка.

Формализм фейнмановских диаграмм.

"Голые" фононные и ликвонные пропагаторы, диаграммная техника Фейнмана, итерационные процедуры, рекуррентные формы, собственно энергетические части, наведенные поля, принудительная генерация ликвонных флуктуаций, гипотеза «зашнуровки».

Связь фононных и ликвонных пропагаторов.

Матрица плотности фононных и ликвонных состояний, представление собственных функций гамильтониана плоскими волнами, изоморфное преобразование слабо взаимодействующих полей топологического и композиционного порядков в систему свободных «одетых» фононов и ликвонов.

Флуктуационно-индуцированная кластеризация.

Корреляционные радиусы функций Грина, их параметрические зависимости от концентрации примеси, условия микрорасслоения и кластеризации, компонентный фазовый переход фрактальных кластеров.

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

Учебная аудитория, оснащенная рабочими станциями, объединенными в сеть.

## **6.Перечень рекомендуемой литературы**

### **Основная литература**

1. А.Л. Шимкевич и др. О формах существования примеси кислорода в жидких металлах / “Термодинамические и молекулярно-кинетические исследования”, Свердловск: УНЦ АН СССР, С. 77, 1985.
2. Н.Н. Пономарев - Степной и др. О компонентном фазовом переходе первого рода // Атомная энергия, 1988, Т.65, №5, С. 319.
3. А.Л. Шимкевич. Флуктуационная теория примесной микронеоднородности жидко-металлических теплоносителей // Изв. ВУЗов. Ядерная энергетика, 1999, № 3, С. 6.
4. I.Yu. Shimkevich, V.V. Kuzin, and A.L. Shimkevich. Dynamic Structure of Oxygen in Liquid Potassium Studied by MD Method and Statistical Geometry // Journal of Non-Crystalline Solids, 1999, V. 250-252, P. 129.
5. A.L. Shimkevich, I.Yu. Shimkevich, and V.V. Kuzin. Molecular Dynamics Study of Ternary System K+K+q+O-2q // Condensed Matter Physics, 1999, v. 2, N 2(18), p.329.

### **Дополнительная литература**

1. А.Л. Шимкевич и др. Цепочечные кластеры растворенного кислорода в расплаве калия / В сб.: Теплофизические исследования, Обнинск: ГНЦ РФ-ФЭИ, 1999, с. 171.
2. А.Л. Шимкевич и др. Атомная динамика жидкого калия и расплава калий–кислород из данных молекулярно-динамического моделирования и экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов // Изв. ВУЗов. Ядерная энергетика. 2000, № 1, с. 40.
3. А.Л. Шимкевич, И.Ю. Шимкевич. МД–исследование микроструктуры и атомной динамики эвтектического сплава Pb0.91K0.09 / Теплофизические свойства веществ (жидкие металлы и сплавы), Нальчик: КБГУ, 2001, С. 9.
4. А.Л. Шимкевич, В.В. Кузин, И.Ю. Шимкевич. МД исследование влияния примеси свинца на микроструктуру и атомную динамику расплава натрия / Теплофизические свойства веществ (жидкие металлы и сплавы), Нальчик: КБГУ, 2001, С. 26.
5. М.Н. Ивановский, Н.Н. Пономарев-Степной, А.Л. Шимкевич. Концепция конструирования теплоносителей ЯЭУ / Теплофизика-2002 (теплоперенос и свойства жидких металлов), Обнинск, 29-31 октября 2002.

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

Не используются

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

На лекционных занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций. В процессе самостоятельной работы обучающиеся используют следующие информационные технологии: GMSH, MPI, OpenGL.

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

Студенты, изучающие курс «Теоретические основы атомной динамики моделирования микроструктуры многокомпонентных конденсированных сред», должны овладеть общим понятийным аппаратом и научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен иметь основные представления о физических процессах проходящих в системах конденсированных сред. Владеть аппаратом фейнмановских диаграмм. Показателем владения материалом служит умение решать задачи и ориентироваться в круге вопросов, связанных с проблемами анализа физики конденсированных сред для ядерных. Для формирования умения применять теоретические знания на практике студенту необходимо применять программные системы, разработанные на основе методов молекулярной динамики.

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 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.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

### ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Суперкомпьютерное моделирование ядерных процессов и технологий Физтех-школа природоподобных, плазменных и ядерных технологий им. И.В. Курчатова кафедра моделирования ядерных процессов и технологий
<b>курс:</b>	<u>4</u>
<b>квалификация:</b>	бакалавр
Семестры, формы промежуточной аттестации:	
	7 (осенний) - Экзамен
	8 (весенний) - Экзамен
<b>Разработчик:</b>	Е.И. Уксусов, канд. техн. наук

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Способен применять фундаментальные знания, полученные в области физико-математических и (или) естественных наук, и использовать их в профессиональной деятельности	ОПК-1.1 Способен анализировать поставленную задачу, намечать пути ее решения
	ОПК-1.2 Способен строить математические модели, производить количественные расчеты и оценки
	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
ОПК-2 Способен использовать современные информационные технологии и программные средства при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности	ОПК-2.2 Знает и умеет применять численные математические методы и прикладное программное обеспечение для решения научных задач в профессиональной области
ОПК-5 Способен участвовать в проведении фундаментальных и прикладных исследований и разработок, самостоятельно осваивать новые теоретические, в том числе, математические методы исследований, и работать на современной экспериментальной научно-исследовательской, измерительно-аналитической и технологической аппаратуре	ОПК-5.1 Способен решать поставленные задачи в области теоретических и экспериментальных исследований и разработок
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Теоретические основы атомной динамики и моделирования микроструктуры многокомпонентных конденсированных сред» обучающийся должен:

### знать:

- принципы и методы молекулярной динамики, методов исследования физики конденсированных сред.

### уметь:

- применять подходы молекулярной динамики для исследований в задачах ядерных технологий.

### владеть:

- методами компьютерного моделирования и молекулярной динамики, методами разработки проблемно-моделирующих сред на современных суперкомпьютерных системах.

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

Не предусмотрено.

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

Контрольные вопросы для сдачи экзамена в 7-ом семестре:

1. Модель тетраэдрического газа.
2. Модель раствора внедрения и полиморфизм бинарного расплава.
3. Коэффициент тетраэдричности симплексов Делоне.



4. Компонентный фазовый переход и модель раствора дополнения.
5. Конфигурационная энтропия кластеризации, статистический вес растворителя.
6. Химические потенциалы компонент бинарного расплава.
7. Молекулярно-динамическое моделирование систем  $Pb_{1-x}Kx$  и  $Na_{1-x}Pbx$ .
8. Выбор парных потенциалов.

Контрольные вопросы для сдачи экзамена в 8-ом семестре:

1. Корреляционные функции атомных конфигураций, характеристики атомной динамики.
2. Эффект электроотрицательности компонент в микроструктуре бинарных расплавов.
3. Композиционная коррекция свойств натриевого теплоносителя.
4. МД модель смеси  $Na_{1-x}Pbx$ , ее корреляционные функции и динамические характеристики.
5. Визуализация модели микронеоднородности расплава.
6. Экспериментальная проверка модели.
7. Метод функции Грина.
8. Верификация моделей методом рассеяния ультра холодных нейтронов.
9. Формализм фейнмановских диаграмм.
10. Матрица плотности фононных и ликвонных состояний.
11. Корреляционные радиусы функций Грина.
12. Условия микрорасслоения и кластеризации.
13. Компонентный фазовый переход фрактальных кластеров.

Примеры экзаменационных билетов в 7-ом семестре:

Билет 1.

1. Модель тетраэдрического газа.
2. Конфигурационная энтропия кластеризации, статистический вес растворителя.

Билет 2.

1. Модель раствора внедрения и полиморфизм бинарного расплава.
2. Химические потенциалы компонент бинарного расплава.

Примеры экзаменационных билетов в 8-ом семестре:

Билет 1.

1. Корреляционные функции атомных конфигураций, характеристики атомной динамики.
2. Метод функции Грина.

Билет 2.

1. Эффект электроотрицательности компонент в микроструктуре бинарных расплавов.
2. Формализм фейнмановских диаграмм.

#### 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 недочётами.

Оценка "хорошо" (7 баллов) выставляется студенту, если он твёрдо 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 твёрдо 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**

При проведении оценивания знаний обучающемуся предоставляется время на подготовку на усмотрение экзаменатора. Опрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа. Оценивание знаний производится в соответствии с вышеуказанными критериями в соответствии с содержанием дисциплины.