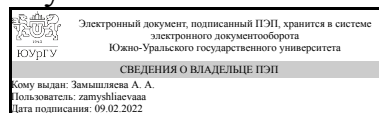


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Институт естественных и точных
наук



А. А. Замышляева

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины П.1.В.06.01 Многомасштабное моделирование материалов
для направления 22.06.01 Технологии материалов

уровень аспирант **тип программы**

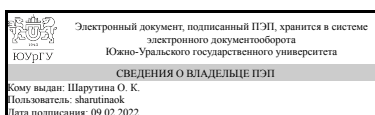
направленность программы

форма обучения очная

кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

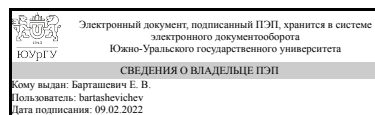
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 22.06.01 Технологии материалов, утверждённым приказом Минобрнауки от 30.07.2014 № 888

Зав.кафедрой разработчика,
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,
д.хим.н., доц., профессор



Е. В. Барташевич

1. Цели и задачи дисциплины

Помочь овладеть методами, алгоритмами и инструментами моделирования структуры и особенностей строения химических соединений и наноматериалов, развить понятие "цифровой двойник материалов", научиться определяться с масштабным уровнем, необходимым на заданном этапе исследований свойств и построения прогнозов.

Краткое содержание дисциплины

Дисциплина раскрывает статус математического моделирования в химии и материаловедении, как метода познания взаимосвязей состава, строения и свойств. В зависимости от уровня и размеров системы могут применяться методы квантовой химии, молекулярной динамики, приближения циклического кластера для поверхностей твердых тел, кристаллов и наночастиц, модели сплошной среды. Квантовохимические расчеты позволяют сделать выводы о взаимодействиях компонентов системы на основе распределений электронной плотности. Результаты моделирования должны обеспечивать достоверный прогноз физико-химических свойств, реакционную способность, состояние дисперсных систем, фазовые переходы и свойства наноразмерных объектов.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (ЗУНы)
ОПК-5 способностью и готовностью использовать на практике интегрированные знания естественнонаучных, общих профессионально-ориентирующих и специальных дисциплин для понимания проблем развития материаловедения, умение выдвигать и реализовывать на практике новые высокоэффективные технологии	Знать: Проблемы и пути развития материаловедения, особенности методов познания в науках о материалах и наноматериалах.
	Уметь: Применять методы моделирования атомно-молекулярных систем для получения информации о свойствах материалов и наноматериалов.
	Владеть: Методами моделирования химических соединений и материалов.
ПК-7.1 способностью применять классические теории и современные концепции о строении вещества в задачах многомасштабного моделирования структуры и свойств наноматериалов	Знать: Проблемы и пути развития компьютерного материаловедения, концепции, направленные на изучение структуры и зависящих от структуры свойств функциональных материалов и наноматериалов.
	Уметь: Использовать классические и современные компьютерные программы и среды для моделирования свойств материалов и наноматериалов.
	Владеть: Анализом результатов моделирования химических соединений и материалов и наноматериалов.

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин,	Перечень последующих дисциплин,
------------------------------------	---------------------------------

видов работ учебного плана	видов работ
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	Подготовка научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук (5 семестр)

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	Знать: основы квантовой химии, молекулярной механики и молекулярной динамики, теорию химической связи, принципы построения структурных моделей молекул. Уметь производить квантово-химические расчеты методами Хартри-Фока и Кона-Шема. Обладать навыками формирования входных файлов и обработки выходных данных, получаемых в ходе компьютерного моделирования молекул.

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 ч.

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		2	
Общая трудоёмкость дисциплины	108	108	
<i>Аудиторные занятия:</i>	40	40	
Лекции (Л)	40	40	
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0	
Лабораторные работы (ЛР)	0	0	
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	68	68	
Написание реферата	32	32	
Подготовка к текущему контролю. Моделирование свойств электронной плотности.	36	36	
Вид итогового контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен	

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Масштабные уровни описания строения химических соединений и материалов	12	12	0	0
2	Вычислительные технологии, ориентированные на многомасштабное моделирование в материаловедении	8	8	0	0
3	Моделирование строения наночастиц и изучение свойств	10	10	0	0

	наноматериалов				
4	3D визуализация периодических атомно-молекулярных систем	10	10	0	0

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1-2	1	Молекулярная динамика, метадинамика, комбинированные подходы QM/MM, моделирование многокомпонентных атомно-молекулярных систем и наночастиц.	6
3-5	1	Многоконфигурационные приближения в FireFly. Теория функционала плотности. Моделирование в приближении изолированного комплекса. Базис плоских волн. Локализованные базисы для периодических расчетов кристаллов.	6
6-7	2	Задачи моделирования в нанотехнологиях, требующие высокопроизводительных вычислений и параллельного программирования. Классификация функций MPI и основные понятия.	4
8-9	2	Применение суперкомпьютеров. Обзор высокопроизводительных систем в России и за рубежом. Проблемы энергопотребления и надежности суперкомпьютеров.	4
10-12	3	Периодические граничные условия. Поверхности потенциальной энергии. Единицы измерения. Электрон-электронное взаимодействие: обменно-корреляционное взаимодействие, функционал Кона-Шэма, приближение локальной плотности.	4
13-15	3	Программа CRYSTAL14 - вычисления спектральных свойств: волновых чисел, интенсивностей и активностей ИК и КР спектров. Эластические свойства, модули упругости и сдвига. Электронная плотность в кристаллах: TOPOND14. Квантово-топологический анализ электронной плотности в молекулярных кристаллах.	6
16-17	4	ChemCraft - приложение для визуализации и анализа результатов моделирования молекул, кристаллов, конденсированных фаз.	4
18-19	4	Multiwfn vs TOPOND - сравниваем преимущества визуализации и анализа характеристик электронной плотности.	6

5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС		
Вид работы и содержание задания	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц)	Кол-во часов
Подготовка к текущему контролю. Моделирование свойств электронной плотности.	Мануал Crystal: с. 10-20. Мануал Topond - все главы.	36
Подготовка реферата.	Бейдер, Р. Атомы в молекулах: Квантовая	32

	теория Учеб. Р. Бейдер; Пер. с англ. Е. С. Апостоловой и др.; Под ред. М. Ю. Антипина, В. Г. Цирельсона. М.: Мир, 2001. с. 54-160, Гл. 7. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела Текст учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бинوم. Лаборатория знаний, 2014. гл. 4-5. Периодические научные издания: Соломатов В.И. Развитие полиструктурной теории композиционных строительных материалов Текст. / В.И. Соломатов // Известия вузов. Архитектура и строительство. -1985. № 8. - С. 44-53.	
--	---	--

6. Инновационные образовательные технологии, используемые в учебном процессе

Не предусмотрены

Собственные инновационные способы и методы, используемые в образовательном процессе

Инновационные формы обучения	Краткое описание и примеры использования в темах и разделах
Дискуссии и семинары с приглашенными учеными из UCF (Университет Центральной Флориды) и ИОС УрО РАН	Обсуждение и тренировка в освоении программы моделирования конденсированных состояний CP2K

Использование результатов научных исследований, проводимых университетом, в рамках данной дисциплины: 1. Государственное задание 2020073-ГЗ №0853-2020-0019 Наименование темы: На пути к новым гибридным материалам: цифровое моделирование структуры и свойств от атомно-молекулярного уровня до наночастиц.

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.1. Паспорт фонда оценочных средств

Наименование разделов дисциплины	Контролируемая компетенция ЗУНы	Вид контроля (включая текущий)	№№ заданий
Все разделы	ОПК-5 способностью и готовностью использовать на практике интегрированные знания естественнонаучных, общих профессионально-ориентирующих и специальных дисциплин для понимания проблем развития материаловедения, умение выдвигать и реализовывать на практике новые	Текущий - проверка результатов расчетов	1-2

	высокоэффективные технологии		
Все разделы	ОПК-5 способностью и готовностью использовать на практике интегрированные знания естественнонаучных, общих профессионально-ориентирующих и специальных дисциплин для понимания проблем развития материаловедения, умение выдвигать и реализовывать на практике новые высокоэффективные технологии	Экзамен	1
3D визуализация периодических атомно-молекулярных систем	ПК-7.1 способностью применять классические теории и современные концепции о строении вещества в задачах многомасштабного моделирования структуры и свойств наноматериалов	Текущий - проверка результатов визуализации расчетов	1
Вычислительные технологии, ориентированные на многомасштабное моделирование в материаловедении	ПК-7.1 способностью применять классические теории и современные концепции о строении вещества в задачах многомасштабного моделирования структуры и свойств наноматериалов	Экзамен	1

7.2. Виды контроля, процедуры проведения, критерии оценивания

Вид контроля	Процедуры проведения и оценивания	Критерии оценивания
Экзамен	Аспирант предоставляет написанный реферат на предложенную тему по материалам периодических изданий, в которых отражен передовой опыт моделирования наносистем.	Отлично: Объем не менее 30 листов, тема раскрыта, цитируются новейшие источники из периодических научных журналов списка Scopus, Web of Science, приводятся самостоятельно выполненные иллюстрации. Хорошо: Объем менее 30 листов, но не менее 20, , тема раскрыта, цитируются периодические научные журналы, приводятся заимствованные иллюстрации. Удовлетворительно: Объем не менее 10 листов, но меньше 20, цитируются периодические научные журналы 10-летней давности, иллюстрации не приводятся. Неудовлетворительно: Реферат отсутствует.
Текущий - проверка результатов расчетов	Аспирант предоставляет выходные файлы результатов моделирования, проведенных расчетов, выполненные самостоятельно.	Зачтено: Расчеты выполнены корректно Не зачтено: Расчеты выполнены с ошибками или не выполнены
Текущий - проверка результатов визуализации расчетов	Аспирант предоставляет файлы результатов визуализации моделей, выполненные самостоятельно.	Зачтено: Визуализация производится корректно Не зачтено: Визуализация производится не корректно или не производится

7.3. Типовые контрольные задания

Вид контроля	Типовые контрольные задания
Экзамен	Темы рефератов:

	<p>1. Метод Кара-Паринелло: первопринципные расчеты и классическая динамика для наносистем.</p> <p>2. Молекулярные машины.</p> <p>3. Методы QM/MM: квантовая и классическая части для наноразмерных систем.</p> <p>4. Компьютерное материаловедение строительных композиционных материалов.</p> <p>5. Особенности моделирования наноразмерных кластеров и периодических систем.</p> <p>6. Новинки молекулярной графики.</p>
Текущий - проверка результатов расчетов	<p>Задание 1</p> <p>Подготовьте входные файлы для оптимизации геометрии кристаллов с сохранением параметров ячейки в программе CRYSTAL для следующих структур: MELAMI, IJUGOL, UREXPO.</p> <p>Запустите исполняемые файлы. Проанализируйте полученные результаты, сравните отклонения в позициях атомных координат.</p> <p>Задание 2</p> <p>Выполните построение карт электронной плотности в кристаллах для следующих плоскостей:</p> <p>1) N – C – O в кристалле UREXPO</p> <p>2) O – Sb – C в кристалле IJUGOL</p> <p>3) ароматического цикла в кристалле MELAMI</p>
Текущий - проверка результатов визуализации расчетов	<p>Задание 1. Подготовьте входные файлы визуализации структуры, электронных свойств для моделей, полученных в программах CRYSTAL, Siesta, Topond для следующих структур: MELAMI, IJUGOL, UREXPO.</p>

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Бейдер, Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория Учеб. Р. Бейдер; Пер. с англ. Е. С. Апостоловой и др.; Под ред. М. Ю. Антипина, В. Г. Цирельсона. - М.: Мир, 2001. - 532 с.
2. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела Текст учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. ил., [12] л. цв. ил.; табл.

б) дополнительная литература:

1. Барташевич, Е. В. Структурная организация и количественные дескрипторы физико-химических свойств соединений с галогенными связями по данным о распределении электронной плотности Текст дис. ... д-ра хим. наук : специальность 02.00.04 - Физическая химия Е. В. Барташевич ; науч. консультант В. Г. Цирельсон ; Юж.-Урал. гос. ун-т ; ЮУрГУ. - Челябинск, 2015. - 242 с. цв. ил.
2. Юшина, И. Д. Физико-химические свойства и структурные особенности халькогеназоло(азино)хинолиниевых полийодидов Текст дис. ... канд. хим. наук : специальность 02.00.04 - Физическая химия И. Д. Юшина ; науч. рук. Е. В. Барташевич ; Юж.-Урал. гос. ун-т ; ЮУрГУ. - Челябинск, 2016. - 183 с. ил.

3. Multiscale modeling in solid mechanics : computational approaches
Текст V. G. Kouznetsova et al.; eds. U. Galvanetto, M. H. F. Aliabadi. - London: Imperial College Press, 2010

4. Маделунг, О. Теория твердого тела Пер. с нем. И. В. Мочан; Под ред. А. И. Ансельма. - М.: Наука, 1980. - 416 с. ил.

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

1. ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК. СЕРИЯ ХИМИЧЕСКАЯ

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Мануал для расчетов распределения электронной плотности в кристаллах, исходя из волновой функции

2. Барташевич, Е. В. Строение вещества [Текст] метод. указания к лаб. работам по направлению 04.03.01 "Химия" Е. В. Барташевич, С. Э. Мухитдинова ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2017. - 31, [2] с. ил. электрон. версия

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Мануал для расчетов распределения электронной плотности в кристаллах, исходя из волновой функции

2. Барташевич, Е. В. Строение вещества [Текст] метод. указания к лаб. работам по направлению 04.03.01 "Химия" Е. В. Барташевич, С. Э. Мухитдинова ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2017. - 31, [2] с. ил. электрон. версия

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Елисеев, А. А. Функциональные наноматериалы : учебное пособие / А. А. Елисеев, А. В. Лукашин ; под редакцией Б. Д. Третьякова. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2010. — 456 с. — ISBN 978-5-9221-1120-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/59578 (дата обращения: 06.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Алексенко, А. Г. Графен : учебное пособие / А. Г. Алексенко. — 3-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 179 с. — ISBN 978-5-93208-509-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/166728 (дата обращения: 06.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
3	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Сергеев, А. Г. Нанометрология : монография / А. Г. Сергеев. — Москва : Логос, 2020. — 416 с. — ISBN 978-5-98704-494-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/163080 (дата обращения:

9. Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса

Перечень используемого программного обеспечения:

1. -Firefly(бессрочно)
2. BlueSnap-Chemcraft(бессрочно)

Перечень используемых информационных справочных систем:

1. -Thr Cambridge Cristallographic Data Centre(бессрочно)

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Лекции	407 (1а)	Рабочая станция - компьютеры