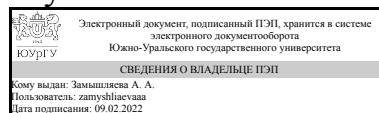


# ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

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**

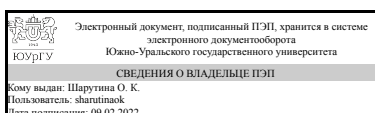
**направленность программы**

**форма обучения** очная

**кафедра-разработчик** Теоретическая и прикладная химия

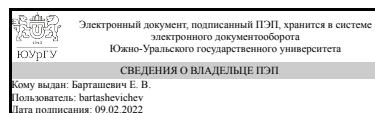
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 22.06.01 Технологии материалов, утверждённым приказом Минобрнауки от 30.07.2014 № 888

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.: Бином. 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:

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

## 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: <a href="https://e.lanbook.com/book/59578">https://e.lanbook.com/book/59578</a> (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: <a href="https://e.lanbook.com/book/166728">https://e.lanbook.com/book/166728</a> (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: <a href="https://e.lanbook.com/book/163080">https://e.lanbook.com/book/163080</a> (дата обращения:



		06.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
--	--	---

## 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 (1a)	Рабочая станция - компьютеры