

АННОТАЦИЯ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

«МЕТОД ДИСКРЕТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ УПАКОВОК И МОДЕЛЬ ПОСЛОЙНОГО РОСТА»

(название дисциплины)

03.06.01 – Физика и астрономия

(код и наименование направления подготовки)

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

(направленность (профиль) подготовки)

Подготовка кадров высшей квалификации

(уровень высшего образования)

2 год обучения

(год обучения)

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины по выбору «Метод дискретного моделирования упаковок и модель послойного роста» являются:

1. Знакомство аспирантов с проблемами современной кристаллографии, еще не нашедшими своего окончательного решения и связанными с передовым ее краем, связанными с задачами описания кристаллической структуры, предсказания кристаллических структур и моделирования процесса образования кристаллов.
2. Изучение основных принципов и математического аппарата метода дискретного моделирования молекулярных упаковок, основанного на представлении кристаллической структуры в виде упаковки дискретных моделей молекул (поликубов) в дискретном упаковочном пространстве.
3. Изучение алгоритмов генерации кристаллических структур молекулярных кристаллов для соединений с молекулами известной геометрии, основанных на методе дискретного моделирования. Освоение комплекса компьютерных программ *DMM* предсказания кристаллических структур молекулярных кристаллов.
4. Знакомство с существующими физическими методами моделирования процесса кристаллообразования и математическими ростовыми моделями. Изучение модели послойного роста и ее применения для анализа кристаллических структур.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Освоение дисциплины опирается на знания, полученные при освоении разделов "Квантовая механика", "Термодинамика", "Физика твердого тела" в вузовском курсе теоретической физики. Данный курс по выбору призван подготовить аспирантов к освоению обязательной дисциплины ОПОП (ВО) «Физика конденсированного состояния».

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

1) Знать:

- классификацию типов межатомной связи в твердых телах (ОПК – 1);
- современные представления о структуре кристаллических и аморфных твердых тел, основные методы их описания и исследования (ОПК – 1);
- взаимосвязь электронной и кристаллической структуры твердых тел с механическими, магнитными, тепловыми и другими свойствами твердых тел (ОПК – 1).

2) Уметь:

- анализировать общие проблемы физики твердого тела и уметь пропагандировать их (ОПК – 1);

- самостоятельно анализировать вопросы взаимосвязи кристаллической и электронной структуры твердых тел с их физико-механическими свойствами (ОПК – 1);
- ориентироваться в тематике научной литературы по общим вопросам физики твердого тела (ОПК – 1).

3) Владеть:

- информацией об общей структуре современной физики твердого тела и понимать перспективы её развития (ОПК – 1);
- фундаментальными принципами описания кристаллической структуры и свойств твердых тел и методами их исследования (ОПК – 1);
- знаниями о взаимосвязи типа и характера межатомного взаимодействия, кристаллической идеальной и дефектной структуры твердых тел с механическими, электронными, магнитными, тепловыми и другими свойствами твердых тел (ОПК – 1).

4. КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Тема 1. Периодические разбиения и упаковки пространства.

Тема 2. Методы предсказания структур молекулярных кристаллов.

Тема 3. Математический аппарат метода дискретного моделирования молекулярных упаковок в кристаллах.

Тема 4. Предсказание структур молекулярных кристаллов методом дискретного моделирования молекулярных упаковок.

Тема 5. Физические модели роста кристаллов. Абстрактные математические модели роста.

Тема 6. Модель послойного роста в разбиениях, упаковках и графах.

Тема 7. Квазипериодические разбиения модели квазикристаллов.

Тема 8. Двумерное квазипериодическое разбиение Розы и его свойства.

5. ВИД АТТЕСТАЦИИ – ЗАЧЕТ.

6. КОЛИЧЕСТВО ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦ – 4.

Составитель: д.в.кадр. ОиТР Малев А.И. *АИ*
должность, ФИО, подпись

Заведующий кафедрой ОиТР Малев А.И. *АИ*
название кафедры ФИО, подпись

Председатель
учебно-методической комиссии направления Исмаилов А.А. *АА*
ФИО, подпись

Директор института Сеев А. И.О. Фамилия Дата: 03.06.2015

