

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Владимирский государственный университет  
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»  
(ВлГУ)



УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор, проректор по научной  
и инновационной работе

В.Г. Прокошев

« 03 » июня 2015 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**«МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ**

**В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ»**

(наименование дисциплины)

Направление подготовки 03.06.01 Физика и астрономия

Направленность (профиль) подготовки Физика конденсированного состояния

Уровень высшего образования Подготовка кадров высшей квалификации

Квалификация выпускника «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Форма обучения очная

Год	Трудоём- кость зач. ед,час.	Лек- ции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРА, час.	Форма промежуточного контроля (экз./зачет)
2	2/72	20	4	-	48	ЗАЧЕТ
Итого	2/72	20	4	-	48	ЗАЧЕТ

г. Владимир 2015 г.

## 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины (модуля) «Математическое и программное обеспечение в физике конденсированного состояния» являются:

1. Формирование навыков самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области структурного анализа кристаллов.
2. Освоения программного обеспечения для расчета энергии межмолекулярного взаимодействия базисной молекулы со всеми молекулами методом атом – атомных потенциалов.
3. Освоения программного обеспечения для расчета площади соприкосновения молекул с помощью полиэдра Вороного – Дирихле.
4. Освоения программного комплекса для исследования координационных окружений в модели послойного роста графов связности.
5. Освоения программного комплекса для построения и исследования мозаик Пенроуза.
6. Освоения программного комплекса для перебора вариантов периодических упаковок полигексов в плоскости.
7. Освоения программного комплекса для перебора вариантов периодических упаковок полимино в плоскости.
8. Освоения программного комплекса для сравнения молекулярных упаковок в кристаллических структурах.
9. Освоения программного комплекса для построения и исследования обобщенных фракталов Рози.
10. Освоение комплекса компьютерных программ SHELX-97 расшифровки и уточнения кристаллических структур по рентген-дифракционным данным и описания молекулярных и кристаллических структур.
11. 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.
12. 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.

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОСНОВНОЙ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ (ОПОП ВО)

Освоение дисциплины «Математическое и программное обеспечение в физике конденсированного состояния» опирается на знания, полученные при освоении разделов "Квантовая механика", "Физика твердого тела" в вузовском курсе теоретической физики. Данная дисциплина подготовит аспиранта к самостоятельным исследованиям некоторых физических свойств кристаллов с помощью теоретико-групповых методов, а так же будет способствовать выполнению научно-исследовательской работы, подготовке кандидатской диссертации и участию в научных конференциях.

В качестве «входных» следует указать знания аспирантами основ аналитической геометрии, линейной алгебры, векторного и тензорного анализа, теории функций комплексного переменного, компьютерного моделирования в физике твердого тела, теории групп. Необходимо также владеть компьютерными технологиями, уметь пользоваться базами данных, пакетами вычислительных программ.

Данный курс по выбору призван подготовить аспирантов к освоению обязательной дисциплины ОПОП (ВО) «Физика конденсированного состояния»

### 3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

- 1) Знать:
  - основы теории симметрии (ОПК – 1);
  - особенности симметрии кристаллических структур и форм кристаллов (ОПК – 1).
- 2) Уметь:
  - использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук (ОПК – 1);
  - использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач (ОПК – 1);
  - применять на практике базовые профессиональные навыки (ОПК – 1);
  - пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации (ОПК – 1);
  - использовать специализированные знания в области теории симметрии для освоения профильных физических дисциплин (ОПК – 1).
- 3) Владеть:
  - методами анализа и описания симметрии молекул, формы кристаллов, кристаллических структур (ОПК – 1);
  - методами вывода наиболее распространенных в природе пространственных групп симметрии кристаллов (ОПК – 1).

### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единиц, 72 часов.

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Год обучения	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу аспирантов и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	СРА	
1.	Метод атом – атомных потенциалов.	2	5	1	-	12	Контрольная работа
2.	Расчет энергии межмолекулярного взаимодействия базисной молекулы со всеми молекулами.	2	5	1	-	12	
3.	Расчет площади соприкосновения молекул с помощью полиэдра Вороного – Дирихле.	2	5	1	-	12	
4.	Математическое моделирование кристаллических структур.	2	5	1	-	12	
<b>ИТОГО:</b>			<b>20</b>	<b>4</b>	<b>-</b>	<b>48</b>	<b>ЗАЧЕТ</b>

## 5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Освоение дисциплины «Математическое и программное обеспечение в физике конденсированного состояния» предполагает использование следующих инновационных форм проведения занятий:

- опережающее обучение (темы 1-4);
- проблемное обучение (темы 2-3);
- компьютерный тренинг (темы 1, 3);

## 6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ АСПИРАНТОВ

### Вопросы зачету

1. Разбиения плоскости на невыпуклые фигуры на примере разбиений на полимино. Проблема пересчета полимино. Разбиения плоскости на полимино.
2. Геометрическая модель кристалла. Расчет энергии кристаллической решетки методом атом-атомных потенциалов.
3. Понятие  $n$ -мерного упаковочного пространства. Простейшие свойства упаковочных пространств.
4. Критерий существования периодической упаковки поликубов
5. Симметрия упаковочных пространств. Группы точечной симметрии УП. Пространственные симметричные преобразования  $n$ -мерных УП. Связь симметричных свойств УП и упаковок поликубов в этом УП.
6. Кодировка периодических упаковок поликубов. Алгоритм перебора всех возможных периодических разбиений плоскости на полимино с заданным числом клеток в фундаментальной области.
7. Алгоритм перебора вариантов периодических упаковок с одним трансляционно-независимым полимино. Алгоритм перебора вариантов периодических упаковок с несколькими трансляционно-независимым полимино.
8. Общие принципы построения алгоритмов предсказания кристаллических структур методом дискретного моделирования. Аппроксимация молекул дискретными моделями поликубами
9. Перебор всех возможных вариантов упаковок поликубов с заданным коэффициентом упаковки.
10. Расчет моделей кристаллических структур, соответствующих найденным вариантам упаковок поликубов.
11. Энергетическая оптимизация полученных моделей кристаллических структур.
12. Энергетический и геометрический сравнительный анализ с целью разбиения модельных кристаллических структур на классы, отвечающие существенно различающимся моделям.
13. Применение метода дискретного моделирования для решения проблемы локализации разупорядоченных сольватных молекул.
14. Принцип автоматизации РСА. Эксперимент, обработка, проведение вычислений.
15. Принцип метода наименьших квадратов (МНК). Матрица нормальных уравнений (свойства). Корреляционная матрица.
16. Полноматричный, блок-диагональный и диагональный МНК. Этап и итерация в МНК.
17. Уточняемые параметры структуры. Эффекты корреляции параметров.
18. МНК с наложением ограничений.
19. Изотропный и анизотропный температурный фактор атома.
20. Учет ангармонизма колебаний атома при уточнении температурного фактора атома.

21. Основные параметры структуры, рассчитываемые из координат атомов. Вероятностная оценка погрешности структурных параметров.

**Задачи к зачету**

1. Рассчитать с помощью метода атом – атомных потенциалов энергии межмолекулярного взаимодействия для двух кристаллических структур, и провести сравнительный анализ.
2. Используя результаты предыдущей задачи провести расчеты площади соприкосновения молекул с помощью полиэдра Вороного – Дирихле.

**Темы рефератов по дисциплине (самостоятельная работа)**

1. Современные автоматические монокристалльные дифрактометры и их математическое обеспечение.
2. Современные методы исследования структур с помощью рентгеновских лучей: топография, малоугловые исследования.
3. Упаковки одинаковых шаров и их плотность.
4. Разбиения пространства на многогранники.
5. Использование разбиения Вороного-Дирихле в кристаллохимии.
6. Современные методы предсказания кристаллических структур.

**7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

№ п/п	Название и выходные данные (автор, вид издания, издательство, издания, количество страниц)	Год издания	Количество экземпляров в библиотеке университета	Наличие в электронной библиотеке ВлГУ	Количество аспирантов, использующих указанную литературу	Обеспеченность аспирантов литературой, %
1	2	3	4	5	6	7
<b>Основная литература</b>						
1.	Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] / И.Г. Каплан. - М.: БИНОМ, 2014.	2014		ЭБС «Консультант студента» <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326556">www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326556</a>	1	100
2.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 3-е изд., испр. (эл.). - М.: БИНОМ, 2014.	2014		ЭБС «Консультант студента» <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323623">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323623</a>	1	100

3.	Физика твердого тела: Учебное пособие / Ю.А. Стрекалов, Н.А. Тенякова. - М.: ИЦ РИОР: НИЦ Инфра-М, 2013. - 307 с - ISBN: 978-5-369-00967-3	2013		ЭБС «Znanium» <a href="http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=36342">http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=36342</a> <u>1</u>	1	100
4.	Физика конденсированного состояния [Электронный ресурс] / Байков Ю.А., Кузнецов В.М. - М.: БИНОМ, 2013.	2013		ЭБС «Консультант студента» <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322596">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322596</a>	1	100
5.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] / Цирельсон В.Г. - М.: БИНОМ, 2012.	2012		ЭБС «Консультант студента» <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996310982">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996310982</a>	1	100
<b>Дополнительная литература</b>						
1	Физическое материаловедение. Ч. 2. Фазовые превращения в металлах и сплавах [Электронный ресурс] : учеб. пособие. В 3 ч. / А.К. Федотов. – Минск : Выш. шк., 2012. – 446 с.: ил. - ISBN 978-985-06-2063-7.	2012		ЭБС «Znanium» <a href="http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=50808">http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=50808</a> <u>2</u>	1	100
2	Дифракционный анализ [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.М. Анищик, В.В. Понарядов, В.В. Углов. – Минск: Выш. шк., 2011. – 215 с - ISBN 978-985-06-1834-4	2011		ЭБС «Znanium» <a href="http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=50698">http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=50698</a> <u>1</u>	1	100
3	Малеев, Андрей	2011	5		1	33

<p>Владимирович.          Модель послойного          роста разбиений,          упаковок и графов :          монография / А. В.          Малеев, А. В. Шутов          ; ВлГУ .— ВлГУ.—          107 с. : ил., табл. —          Библиогр.: с. 100-107          .— ISBN 978-5-8311-          0546-9.</p>					
---	--	--	--	--	--

**Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:**

1. Cambridge Structural Database System. Version 1.18. Cambridge Crystallographic Data Centre, 2015.
2. Программный комплекс для исследования координационных окружений в модели послойного роста графов связанности (регистрационный номер №2013619399).
3. Программный комплекс для построения и исследования мозаик Пенроуза (регистрационный номер №2014618215).
4. Программа перебора вариантов периодических упаковок полигексов в плоскости (регистрационные номер №2014661669).
5. Программа перебора вариантов периодических упаковок полимино в плоскости (регистрационный номер №2013619301).
6. Программа сравнения молекулярных упаковок в кристаллических структурах (регистрационный номер №2015662262).
7. Программа построения и исследования обобщенных фракталов Рози (регистрационный номер № 2015662240).
8. <http://crystal.geology.spbu.ru/studies/materiaux-denseignement>
9. <http://ums.usu.ru/x-ray/Labs1-4/>

**Периодические издания:**

1. Журнал структурной химии
2. Кристаллография

**8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ  
(МОДУЛЯ)**

1. Супер-ЭВМ «СКИФ-Мономах».
2. Персональные компьютеры типа Core i7 2,4 ГГц (16 GB RAM).
3. По договорам о творческом содружестве ВлГУ с Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Нижегородским государственным университетом им. Н.И. Лобачевского имеется возможность проведения экспериментов на современных автоматических монокристалльных дифрактометрах.
4. Доступ к базе данных Cambridge Crystallographic Data Center (CDC).

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО (уровень подготовки кадров высшей квалификации) по направлению 03.06.01 – Физика и астрономия и направленности (профилю) подготовки Физика конденсированного состояния

Рабочую программу составил  д.ф.-м.н, доц. А.В. Малеев

Рецензент (ы)  д.ф.-м.н., профессор кафедры информационных технологий Владимирского филиала Российской академии народного хозяйства и государственной службы при президенте Российской Федерации (РАНХиГС) В.Г. Рау

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры общей и теоретической физики

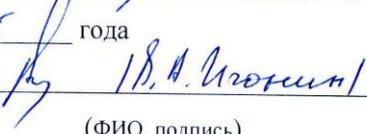
протокол № 10 от 03.06.2015 года.

Заведующий кафедрой 

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 030601-физика и астрономия

Протокол № 1 от 03.06.2015 года

Председатель комиссии

  
(ФИО, подпись)

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ  
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ  
«МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ  
В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ»**

Рабочая программа одобрена на 2016/2017 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 30.08.16 года

Заведующий кафедрой 

Рабочая программа одобрена на 2014/2018 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 30.08.14 года

Заведующий кафедрой 

Рабочая программа одобрена на 2013/2019 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 31.08.18 года

Заведующий кафедрой 

Рабочая программа одобрена на \_\_\_\_\_ учебный год

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_