

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)



Первый проректор, проректор по научной
и инновационной работе

В.Г. Прокошев

« 03 » июня 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**«МЕТОД ДИСКРЕТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ УПАКОВОК И МОДЕЛЬ
ПОСЛОЙНОГО РОСТА»**
(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	Трудоем- кость зач. ед, час.	Лек- ции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРА, час.	Форма промежуточного контроля (экз./зачет)
2	3/108	36	4	-	68	ЗАЧЕТ
Итого	3/108	36	4	-	68	ЗАЧЕТ

г. Владимир 2015 г.

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 *ДММ* 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 ОСНОВНОЙ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ (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 (МОДУЛЯ)

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. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 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.	Периодические разбиения и упаковки пространства.	2	4	1	-	9	Тестирование
2.	Методы предсказания структур молекулярных кристаллов.	2	4		-	9	Тестирование
3.	Математический аппарат метода дискретного моделирования молекулярных упаковок в кристаллах.	2	6	1	-	9	Тестирование
4.	Предсказание структур молекулярных кристаллов методом дискретного моделирования молекулярных упаковок.	2	4		-	9	Тестирование
5.	Физические модели роста кристаллов. Абстрактные математические	2	4		-	8	Тестирование

	модели роста.						
6.	Модель послойного роста в разбиениях, упаковках и графах.	2	4	1	-	8	Тестирование
7.	Квазипериодические разбиения модели квазикристаллов.	2	4		-	8	Тестирование
8.	Двумерное квазипериодическое разбиение Розы и его свойства.	2	4	1	-	8	Тестирование
	ИТОГО:		36	4	-	68	ЗАЧЕТ

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Освоение дисциплины «Метод дискретного моделирования упаковок и модель послойного роста» предполагает использование следующих инновационных форм проведения занятий:

- опережающее обучение (темы 1-4);
- проблемное обучение (темы 2-6);
- компьютерный тренинг (темы 3-5);

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

Вопросы к 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. Термодинамика процесса образования кристалла. Косселевская модель растущего кристалла. Периодические цепи связей.
15. Координационные последовательности.
16. Понятие послойного роста разбиений и упаковок. Отношение соседства фигур упаковки. Форма послойного роста упаковки.
17. Граф связности упаковки и его послойный рост. Алгоритм послойного роста графов.
18. Многогранник послойного роста периодических графов. Свойства многогранника послойного роста периодических графов.
19. Алгоритм построения многогранника послойного роста периодических графов.
20. Спектры многогранников роста реальных кристаллических структур, полученные накладыванием ограничений на граф связности.
21. Оценка устойчивости молекулярных агломератов в молекулярных кристаллах. Многогранники послойного роста, полученные кластеризацией.
22. Послойный рост случайных графов.
23. Подходы к построению квазипериодических разбиений.
24. Симметрия квазикристаллов. Дифракция на квазикристаллах.
25. Построение двумерного квазипериодического разбиения Розы.
26. Точки Розы и слабая параметризация разбиения Розы.
27. Сильная параметризация разбиения Розы.
28. Послойный рост разбиения Розы. Квазипериоды послойного роста разбиения Розы.
29. Вершины разбиения Розы.
30. Фрактальная структура границ разбиения Розы.
31. Симметрия подобия разбиения Розы. Построение ядра и элементарной границы разбиения Розы с помощью композиции преобразований подобия.
32. Построение разбиения Розы как сечения трехмерного периодического разбиения.

Темы рефератов по дисциплине (самостоятельная работа)

1. Упаковки одинаковых шаров и их плотность.
2. Разбиения пространства на многогранники.
3. Использование разбиения Вороного-Дирихле в кристаллохимии.
4. Некоторые обобщения полимино.
5. Современные методы предсказания кристаллических структур.
6. Функция сложности и форсинг квазипериодических разбиений.
7. Абстрактные математические модели роста.

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
Основная литература						
1.	Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] / И.Г. Каплан. - М.: БИНОМ, 2014.	2014		ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326556	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» http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323623	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» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=363421	1	100
4.	Физика конденсированного состояния	2013		ЭБС «Консультант	1	100

	[Электронный ресурс] / Байков Ю.А., Кузнецов В.М. - М.: БИНОМ, 2013.			студента http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322596		
5.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] / Цирельсон В.Г. - М.: БИНОМ, 2012.	2012		ЭБС «Консультант студента» http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996310982	1	100
Дополнительная литература						
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» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=508082	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» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=506981	1	100
3	Малеев, Андрей Владимирович. Модель послыного роста разбиений, упаковок и графов :	2011	5		1	33

монография / А. В. Малеев, А. В. Шутов ; ВлГУ .— ВлГУ.— 107 с. : ил., табл. — Библиогр.: с. 100-107 .— ISBN 978-5-8311-0546-9.					
--	--	--	--	--	--

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 связности (регистрационный номер №2013619399).
3. Программа перебора вариантов периодических упаковок полигексов в плоскости (регистрационный номер №2014661669).
4. Программа перебора вариантов периодических упаковок полимино в плоскости (регистрационный номер №2013619301).
5. Программа сравнения молекулярных упаковок в кристаллических структурах (регистрационный номер №2015662262).
6. <http://crystal.geology.spbu.ru/studies/materiaux-denseignement>
7. <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 Институтом 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 03.06.01-физика и астрономия

Протокол № 1 от 03.06.2015 года

Председатель комиссии _____ 

(ФИО, подпись)

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Рабочая программа одобрена на 2020/21 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 31.08.20 года

Заведующий кафедрой _____



А.В. Машев