

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
профессионального образования
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
Геологический факультет

УТВЕРЖДАЮ

**Декан Геологического факультета
академик**

_____ /Д.Ю. Пушаровский/

« ____ » _____ 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Суперкомпьютерные расчеты в кристаллохимии

Автор-составитель: Еремин Н.Н.

Уровень высшего образования:

Магистратура

Направление подготовки:

05.04.01 «Геология»

Направленность (профиль) ОПОП:

«Геохимия»

Магистерская программа

«Кристаллография и кристаллохимия (ИМ)»

Форма обучения:

Очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методическим Советом Геологического факультета МГУ
(протокол № ____ от _____)

Москва 2019

На обратной стороне титула

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки «Геология» (*программы бакалавриата, магистратуры, реализуемых последовательно по схеме интегрированной подготовки*) в редакции приказа МГУ от 30 декабря 2016 г. № 1674

Год (годы) приемы на обучение – 2019

Геологический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова

Программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения факультета

Цель и задачи дисциплины

Цель: - получение современных представлений о правилах организации кристаллического вещества, изучение взаимосвязи кристаллической структуры с физико-химическими свойствами кристаллов.

Задачи: изучение принципов современных методов предсказания кристаллических структур и их физических свойств на основе знаний, полученных в курсе кристаллохимия;

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО - вариативная часть, профессиональный цикл, дисциплины по выбору, курс 1, семестр 1.

2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия: высшая математика в блоке общенаучной подготовки, знания в блоке профессиональной подготовки по кристаллографии, кристаллохимии и минералогии, курс компьютерное программное обеспечение в кристаллографии, математическое моделирование кристаллических структур.

3. Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников.

ОПК-3.М Способность в процессе решения профессиональных задач самостоятельно получать, интерпретировать и обобщать результаты, разрабатывать рекомендации по их практическому использованию

ОПК-5.М Способность использовать современные вычислительные методы и компьютерные технологии для решения задач профессиональной деятельности

ПК-3.М Способность самостоятельно проводить научные исследования с помощью современного оборудования, информационных технологий, с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта

ПК-4.М Способность создавать и исследовать модели изучаемых объектов на основе использования теоретических и практических знаний в области геологии

СПК-3.М Способность разрабатывать теоретические модели кристаллических структур, прогнозировать поведение химических элементов в природных процессах

СПК-4.М Способность обобщать и использовать результаты исследований для выявления новых явлений, закономерностей, законов и теоретических положений в области кристаллографии и кристаллохимии

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю):

Знать: физико-химические основы кристаллохимии на современном уровне, основные законы, определяющие кристаллическую структуру минералов и их синтетических аналогов, взаимосвязь кристаллической структуры и физических свойств кристаллов, основные программы атомистического моделирования.

Уметь: пользоваться современными программами атомистического моделирования кристаллических структур и физических свойств кристаллического соединения.

Владеть: методическими приемами кристаллохимического прогноза, разнообразными способами описания кристаллических структур, как в стандартном, так и в анионо-центрированном представлении.

4. Формат обучения - лекционные и семинарские занятия

5. Объем дисциплины (модуля) составляет 1 з.е., в том числе, 36/28 в академических часах, отведенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (8 часов –

занятия лекционного типа, 20 часов – занятия семинарского типа, 6 часов на самостоятельную работу обучающихся).

Формы текущего контроля: Контроль усвоения пройденного материала осуществляется на нескольких уровнях. Контроль на всех уровнях выражается в индивидуальной балльно-рейтинговой системе оценки знаний учащихся. Текущий контроль осуществляется путем непосредственного контакта преподавателя с каждым студентом во время семинарских и индивидуальных занятий, путем проверки, анализа и обсуждения домашних работ. Итоговое задание по теме «Методы кристаллохимического прогноза» включает в себя теоретический вопрос, персональную расчетную задачу по пройденному материалу (построение фазовой диаграммы с анализом возможных структурных типов в широком термодинамическом интервале).

Форма промежуточной аттестации – зачет.

Краткое содержание дисциплины (аннотация)

Симметричные и геометрические ограничения существования кристаллической структуры. Конструирование пробных кристаллических структур заданного состава. Принципы полного и локального валентного и координационного баланса. Современный метод валентности связи (МВС). Возможные методы уточнения пробной структуры кристалла. Компьютерное моделирование с использованием атомистических потенциалов межатомного взаимодействия. Квантовохимические расчеты (ab-initio). Основные способы описания и изображения кристаллических структур минералов, кластеров и поверхности кристалла. Особенности программы АтоMS. Взаимодействие программ визуализаторов и кристаллографических баз данных. Основные базы данных - ICSD (Findit), American Mineralogist Crystal structure database, Минкрисст. Особенности работы в них. Программы DLS, BondVal, GULP, Metadise, QE- особенности и границы применимости.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов (трудоемкость в часах)				Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				лекции	семинары	практические занятия, лаб. работы	самост. работа	
1	Современное состояние второго правила Полинга. Значение отклонений от	9	1-2	2	2	-	4	Домашнее расчетное задание

	<p>локального баланса для кристаллохимического анализа.</p> <p>Метод валентности связи.</p> <p>Правило сумм валентности связей, контуры связей. Решение систем линейных уравнений для отыскания значений валентности связей. Программа BONDVAL и тестовые задачи.</p>							
2	Кристаллохимия реальных кристаллов	9	3-4	2	2		4	Домашнее расчетное задание
3	Сравнение квантовохимических и полуэмпирических методов расчетов кристаллических структур. Эволюционные подходы в кристаллохимическом моделировании.	9	5-6	2	2		4	Домашнее расчетное задание
4	Основы уточнения кристаллических структур и свойств кристаллов		7-14	2	14		6	Защита персонального задания

методами минимизации энергии межатомного взаимодействия.							
Промежуточная аттестация зачет							
Всего			8	20			8

Содержание разделов дисциплины

1. Иерархия методов предсказания и уточнения пробной структуры.
2. Возможные эмпирические методы уточнения пробных структур.
3. Возможности атомистического полуэмпирического моделирования.
4. Особенности программы GULP и круг задач, решаемой с ее помощью.
5. Современные методы кристаллохимического прогноза. Метод валентности связи.
6. Особенности программы BondVal и круг задач, решаемой с ее помощью.
7. Расчеты из первых принципов. Возможности и ограничения метода.
8. Эволюционный пакет USPEX и круг задач, решаемых с его помощью.
9. Структурно несовершенные кристаллы. Классификация дефектов кристаллической структуры.
10. Эффект улавливания микропримеси.
11. Анионоцентрированная кристаллохимия.
12. Основные типы анионоцентрированных полиэдров.
13. Особенности программы Atoms и основные приемы работы в ней.
14. Особенности программы Vesta и основные приемы работы в ней.
15. Взаимодействие программ визуализаторов и кристаллографических баз данных.
16. Особенности базы данных ICSD (Findit) и основные приемы работы в ней.
17. TOPOSPRO – визуализация кристаллических структур.
18. TOPOSPRO – анализ координационного окружения атома.

Рекомендуемые образовательные технологии

При освоении дисциплины активно используется образовательная технология педагогических мастерских – преподаватель создаёт атмосферу открытости, доброжелательности, сотворчества в общении, равен ученику в поиске знания, не торопится давать ответы на поставленные вопросы. Исключает официальное оценивание работы учащегося, но через социализацию, афиширование работ даёт возможность появления самооценки учащегося, её изменения, самокоррекции.

В курсе предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм проведения занятий. Учащиеся знакомятся с современными методами изучения

кристаллического вещества на макро- и микро-уровне. По результатам внеаудиторной работы студенты под руководством преподавателя готовят решение индивидуальных задач по основным разделам дисциплины и защищают их на семинарах.

При чтении лекций используются интерактивные лекции-визуализации с выделением в визуальной форме основных понятий кристаллохимии.

При проведении семинарских занятий используются ролевые игры, имитирующие реальные задачи, имеющие практическую значимость.

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

Домашние задания для самостоятельной подготовки студентов.

- 1) Проведя анализ топологии структурного типа оливина предсказать межатомные расстояния в изоструктурных соединениях: форстерите Mg_2SiO_4 , монтичеллите $CaMgSiO_4$ и хризоберилле Al_2BeO_4 .
- 2) Провести оптимизацию структуры корунда Al_2O_3 по заданному набору потенциалов.
- 3) Провести уточнение модели потенциалов для моделирования тербиевого ксенотима $TbPO_4$ по структурным данным и последующее оптимизационное моделирование физических и термодинамических свойств соединения при заданной температуре.
- 4) Персональное задание – провести оптимизацию структур со стехиометрией ABX_n в диапазоне температур 0-1800 К и давлений 0-50 ГПа и построить фазовую диаграмму для заданного химического состава.

Текущий контроль осуществляется путем непосредственного контакта преподавателя с каждым студентом во время семинарских и индивидуальных занятий

8. Ресурсное обеспечение:

А) Перечень основной и дополнительной литературы

Основная литература

Урусов В.С., Еремин Н.Н. Атомистическое компьютерное моделирование структуры и свойств неорганических кристаллов и минералов, их дефектов и твердых растворов место издания ГЕОС Москва, ISBN 978-5-89118-581-0, 448 с. **Монография имеется в количестве 40 экземпляров.**

Дополнительная литература:

- 1) Урусов В.С. Принцип минимума диссимметризации и его нарушение редкими новыми минералами. Докл. АН. 2002. Т.386. №3. С.379-383.
- 2) Урусов В.С. Теория изоморфной смесимости. М.: Наука. 1977.
- 3) Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. М.: Изд. МГУ. 1987.

- 4) Урусов В.С., Таусон В.Л., Акимов В.В. Геохимия твердого тела. М.: ГЕОС. 1997.
- 5) *Gale J.D., Rohl A.I.* The General Utility Lattice Program (gulp), *Molecular Simulation*. 2003 V. 29, N. 5, Pp.291-341.

В) Профессиональная база данных ICSD

Г) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы GULP (ives.org/gulp/)

Д) Материально-техническое обеспечение дисциплины

а) специализированная аудитория, рассчитанная на группу до 10 учащихся,

б) Вычислительный 16-ядерный кластер кафедры кристаллографии и кристаллохимии, компьютерный класс.

г) база исследований ряда структурных семейств

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватель – профессор Еремин Н.Н.

11. Автор-составитель программы профессор Н.Н.Еремин