



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

Рубцовский индустриальный институт (филиал)
федерального государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования
«Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»
(РИИ АлтГТУ)

Е.А. ДУДНИК

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Методические указания по выполнению лабораторных работ
для студентов направления подготовки
«Информатика и вычислительная техника»

Рубцовск 2021

ББК 81.2

Дудник, Е.А. Компьютерное моделирование физических процессов: методические указания по выполнению практических заданий для студентов направления «Информатика и вычислительная техника» /Е.А. Дудник; Рубцовский индустриальный институт. – Рубцовск: РИИ, 2021. – 36 с. [ЭР].

Данные учебно-методические рекомендации предназначены для студентов направлений подготовки «Информатика и вычислительная техника», изучающих дисциплину «Компьютерное моделирование физических процессов».

Рассмотрены и одобрены на заседании кафедры ПМ Рубцовского индустриального института.
Протокол № 9 от 18.03.2021 г.

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Содержание компетенции	Индикатор	Содержание индикатора
ПК-15	Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	ПК-15.1	Подготавливает статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации
		ПК-15.2	Разрабатывает программные компоненты для проведения исследовательских работ

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), предшествующие изучению дисциплины, результаты освоения которых необходимы для освоения данной дисциплины.	Программирование, Программирование приложений
Дисциплины (практики), для которых результаты освоения данной дисциплины будут необходимы, как входные знания, умения и владения для их изучения.	Выпускная квалификационная работа, Преддипломная практика

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося

3.1 Для очного обучения: общий объем дисциплины в з.е. /час: 7 / 252

Форма обучения	Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (час)
	Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа	
очная	32	32	32	156	110

3.2 Для заочного обучения: Общий объем дисциплины в з.е. /час: 7 / 252

Форма обучения	Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (час)
	Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа	
заочная	16	16	16	204	55

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

Форма обучения: очная

Семестр: 6

Объем дисциплины в семестре з.е. /час: 3 / 108

Форма промежуточной аттестации: Экзамен

Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (час)
Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа	
16	16	16	60	53

Лекционные занятия (16ч.)

1. Методология компьютерного моделирования наносистем(2ч.)[3,4,5] Общие принципы компьютерного моделирования. Методологические основы вычислительной нанотехнологии.
2. Квантовое описание структуры атомного мира(2ч.)[3,4,5] Предпосылки создания квантовой механики. Основные понятия и математический аппарат квантовой механики. Свойство одноэлектронных атомов.
3. Моделирование строения атомов(2ч.)[2,3,4,5] Электронная теория строения атомов. Метод Харти-Фока. Атомные орбитали. Теория функциональной плотности.
4. Моделирование молекулярных систем.(2ч.)[1,2,4] Физико-химические закономерности строения молекул. Расчет поверхности потенциальной энергии.
5. Межмолекулярные взаимодействия(2ч.)[4,5,6] Межмолекулярные силы. Потенциалы взаимодействия частиц. Молекулярная динамика. Молекулярная механика. Моделирование методами Монте-Карло
6. Механизмы образования наноструктур(2ч.)[2,3] Модели нанокластеров. Молекулярная самосборка
7. Многомасштабное моделирование материалов и процессов(2ч.)[2,3,4,5] Концепция многомасштабного моделирования. Многомасштабное моделирование энергетических процессов. Моделирование в наноструктурной области. Моделирование макроскопических систем
8. Программное обеспечения моделирования наносистем(2ч.)[1,2,8,9] Программы моделирования наносистем. Интегрированные пакеты программ.

Практические занятия (16ч.)

1. Индексы Миллера. Построения атомных плоскостей кристаллической решетки.(4ч.)[1,2,4,8]
2. Расчет энергетических характеристик системы атомов.(4ч.)[1,2,3,8]
3. Математические методы описания физических процессов. Метод молекулярной динамики для двумерных кристаллов(4ч.)[2,3,5]

4. Описание математической и физической модели. Анализ результатов полученных ранее. Подготовка статьи для размещения в средствах массовой информации.(4ч.)[1,4]

Лабораторные работы (16ч.)

1. Разработка программного модуля создания атомных плоскостей гранецентрированной кристаллической решетки(4ч.)[1,4,6,7,10]
2. Разработка программного модуля формирования точечных, линейных дефектов в атомной плоскости гранецентрированной кристаллической решетки.(4ч.)[1,2,4,10]
3. Разработка программного модуля расчета энергетических характеристик двумерных кристаллов, заданных металлов с использованием потенциала межатомных взаимодействий(4ч.)[1,2,4]
4. Разработка программного модуля расчета энергетических характеристик двумерных кристаллов, заданных бинарных сплавов с использованием потенциала межатомных взаимодействий(4ч.)[1,2,4,7]

Самостоятельная работа (60ч.)

1. Подготовка к лабораторным работам(8ч.)[3,4,5,6,8]
2. Изучение литературы(8ч.)[2,3,5,6,8]
3. Подготовка к экзамену(36ч.)[2,3,5,6,8]
4. Подготовка к практическим занятиям(8ч.)[2,3,4,6]

Семестр: 7

Объем дисциплины в семестре з.е. /час: 4 / 144

Форма промежуточной аттестации: Экзамен

Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (час)
Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа	
16	16	16	96	57

Лекционные занятия (16ч.)

1. Методы моделирования в физики конденсированного состояния(2ч.)[1,2,9] Статистическая теория упорядоченности. Потенциалы межатомного взаимодействия. Методы моделирования компьютерных экспериментов. Методика проведения компьютерного эксперимента.
2. Исследования атомного упорядочения в сплавах со сверхструктурой L12(2ч.)[1,6,7] Общие сведения об атомном упорядочении сплавов. Атомные механизмы превращений порядок - беспорядок. факторы влияющие на процесс структурных превращений порядок- беспорядок. Роль компьютерного эксперимента в исследовании теории упорядочения.
3. Разработка программных компонент для проведения исследовательских работ с помощью компьютерных экспериментов. {лекция с разбором конкретных

ситуаций} (4ч.)[1,2,9] Моделирование процесса атомного механизма структурных превращений методом молекулярной динамики (2ч).

Моделирование процесса атомного механизма структурных превращений методом Монте-Карло (2ч).

4. Разработка программных компонентов для исследования влияния геометрического и термического фактора на процесс структурных превращений в упорядочивающихся сплавах.(2ч.)[1,2,4,8]

5. Разработка компонентов исследования влияния температуры и деформации на особенности процесса структурного фазового перехода в упорядочивающихся сплавах.(2ч.)[2,4,5]

6. Описание информационных и математических процессов в области физики твердого тела(2ч.)[1,2,3]

7. Анализ результатов. Сравнения своих результатов с другими авторами. Визуализация результатов. Подготовка короткого сообщения о результатах выполненной работы. Подготовка статьи с описанием компьютерных экспериментов для размещения в сборниках конференциях.(2ч.)[1,4,6]

Практические занятия (16ч.)

1. Планирование компьютерного эксперимента. Описания математической и физической модели для физических процессов в трехмерном кристалле.(4ч.)[1,9]

2. Анализ работ других авторов, проводивших исследовательские работы в области физики твердого тела методом компьютерного эксперимента. Выявления проблемы, разработка планы компьютерного эксперимента для проведения исследовательских работ. Выбор предмета исследования. Выбор объекта исследования. Выбор метода исследования. Выбор метода представления результатов(4ч.)[3,4,6,7]

3. Сбор данных для описания физической модели. Подборка данных из аналогичных натуральных экспериментов. Разработка методов сравнения результатов.(4ч.)[1,3,4]

4. Работа над оформлением результатов исследовательской работы. Описание анализа результатов. Оформление статьи для опубликования в средствах массовой информации(4ч.)[1,3,4]

Лабораторные работы (16ч.)

1. Разработка программных компонент для создания трехмерной гранецентрированной кристаллической решетки. Предусмотреть ввод структурных дефектов в кристалл.(4ч.)[1,2,8,9]

2. Разработать программный компонент для расчета значений потенциала межатомного взаимодействия.(4ч.)[1,2,8,9]

3. Разработать программные компоненты для проведения моделирования процесса структурного фазового перехода методом Монте-Карло.(4ч.)[1,2,8,9]

4. Разработать программные компоненты для проведения моделирования процесса структурного фазового перехода методом молекулярной динамики.(4ч.)[1,2,8,9]

Самостоятельная работа (96ч.)

1. Подготовка к экзамену(36ч.)[2,3,4,8,9]
2. Изучение литературных источников(28ч.)[4,7,8,9]
3. Подготовка к защите лабораторных работ(16ч.)[2,4,8,9]
4. Подготовка к практических занятиям(16ч.)[1,3,7]

Форма обучения: заочная

Семестр: 8

Объем дисциплины в семестре з.е. /час: 4 / 144

Форма промежуточной аттестации: Экзамен

Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (час)
Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа	
8	8	8	120	28

Лекционные занятия (8ч.)

1. Методология компьютерного моделирования наносистем(1ч.)[3,4,5] Общие принципы компьютерного моделирования. Методологические основы вычислительной нанотехнологии.
2. Квантовое описание структуры атомного мира(1ч.)[3,4,5] Предпосылки создания квантовой механики. Основные понятия и математический аппарат квантовой механики. Свойство одноэлектронных атомов.
3. Моделирование строения атомов(1ч.)[2,3,4,5] Электронная теория строения атомов. Метод Хартри-Фока. Атомные орбитали. Теория функциональной плотности.
4. Моделирование молекулярных систем.(1ч.)[1,2,4] Физико-химические закономерности строения молекул. Расчет поверхности потенциальной энергии.
5. Межмолекулярные взаимодействия(1ч.)[4,5,6] Межмолекулярные силы. Потенциалы взаимодействия частиц. Молекулярная динамика. Молекулярная механика. Моделирование методами Монте-Карло
6. Механизмы образования наноструктур(1ч.)[2,3] Модели нанокластеров. Молекулярная самосборка
7. Многомасштабное моделирование материалов и процессов(1ч.)[2,3,4,5] Концепция многомасштабного моделирования. Многомасштабное моделирование энергетических процессов. Моделирование в наноструктурной области. Моделирование макроскопических систем
8. Программное обеспечения моделирования наносистем(1ч.)[1,2,8,9] Программы моделирования наносистем. Интегрированные пакеты программ.

Практические занятия (8ч.)

1. Индексы Миллера. Построения атомных плоскостей кристаллической

решетки.(2ч.)[1,2,4,8]

2. Расчет энергетических характеристик системы атомов.(2ч.)[1,2,3,8]

3. Математические методы описания физических процессов. Метод молекулярной динамики для двумерных кристаллов(2ч.)[2,3,5]

4. Описание математической и физической модели. Анализ результатов полученных ранее. Подготовка статьи для размещения в средствах массовой информации.(2ч.)[1,4]

Лабораторные работы (8ч.)

1. Разработка программного модуля создания атомных плоскостей гранцентрированной кристаллической решетки(2ч.)[1,4,6,7,10]

2. Разработка программного модуля формирования точечных, линейных дефектов в атомной плоскости гранцентрированной кристаллической решетки(2ч.)[1,2,4,10]

3. Разработка программного модуля расчета энергетических характеристик двумерных кристаллов заданных металлов с использованием потенциала межатомных взаимодействий(2ч.)[1,2,4]

4. Разработка программного модуля расчета энергетических характеристик двумерных кристаллов заданных бинарных сплавов с использованием потенциала межатомных взаимодействий(2ч.)[1,2,4,7]

Самостоятельная работа (120ч.)

1. Подготовка к лабораторным работам(33ч.)[3,4,5,6,8] Разработка компонентов программного модуля для проведения компьютерных экспериментов

2. Изучение литературы(32ч.) [2,3,5,6,8] Изучение научной литературы, материалов сборников научных трудов и конференций . Обзор литературы по компьютерному моделированию для сравнения результатов , полученных другими авторами.

3. Подготовка к экзамену(9ч.) [2,3,5,6,8]

4. Подготовка к практическим занятиям(28ч.)[2,3,4,6] Изучение исследовательских данных других авторов. Подготовка статьи с описанием физических и математических процессов для размещения в средствах массовой информации

5. Выполнение письменной контрольной работы(18ч.)[1,2,3,4,6]

Семестр: 9

Объем дисциплины в семестре з.е. /час: 3 / 108

Форма промежуточной аттестации: Экзамен

Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (час)
Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа	
8	8	8	84	27

Лекционные занятия (8ч.)

1. Методы моделирования в физики конденсированного состояния(1ч.)[1,2,9] Статистическая теория упорядоченности. Потенциалы межатомного взаимодействия. Методы моделирования компьютерных экспериментов. Методика проведения компьютерного эксперимента.
2. Исследования атомного упорядочения в сплавах со сверхструктурой L12(1ч.)[1,6,7] Общие сведения об атомном упорядочении сплавов. Атомные механизмы превращений порядок - беспорядок. факторы влияющие на процесс структурных превращений порядок- беспорядок. Роль компьютерного эксперимента в исследовании теории упорядочения.
3. Разработка программных компонент для проведения исследовательских работ с помощью компьютерных экспериментов. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (2ч.)[1,2,9] Моделирование процесса атомного механизма структурных превращений методом молекулярной динамики (2ч). Моделирование процесса атомного механизма структурных превращений методом Монте-Карло (2ч).
4. Разработка программных компонент для исследования влияния геометрического и термического фактора на процесс структурных превращений в упорядочивающихся сплавах.(1ч.)[1,2,4,8]
5. Разработка компонент исследования влияния температуры и деформации на особенности процесса структурного фазового перехода в упорядочивающихся сплавах.(1ч.)[2,4,5]
6. Описание информационных и математических процессов в области физики твердого тела(1ч.)[1,2,3]
7. Анализ результатов. Сравнения своих результатов с другими авторами. Визуализация результатов. Подготовка короткого сообщения о результатах выполненной работы. Подготовка статьи с описанием компьютерных экспериментов для размещения в сборниках конференциях.(1ч.)[1,4,6]

Практические занятия (8ч.)

1. Планирование компьютерного эксперимента. Описания математической и физической модели для физических процессов в трехмерном кристалле.(2ч.)[1,9]
2. Анализ работ других авторов, проводивших исследовательские работы в области физики твердого тела методом компьютерного эксперимента. Выявления проблемы, разработка планы компьютерного эксперимента для проведения исследовательских работ. Выбор предмета исследования. Выбор объекта исследования. Выбор метода исследования. Выбор метода представления результатов(2ч.)[3,4,6,7]
3. Сбор данных для описания физической модели. Подборка данных из аналогичных натуральных экспериментов. Разработка методов сравнения результатов.(2ч.)[1,3,4]
4. Работа над оформлением результатов исследовательской работы. Описание анализа результатов. Оформление статьи для опубликования в средствах массовой информации(2ч.)[1,3,4]

Лабораторные работы (8ч.)

1. Разработка программных компонент для создания трехмерной границентрированной кристаллической решетки. Предусмотреть ввод структурных дефектов в кристалл.(2ч.)[1,2,8,9]
2. Разработать программный компонент для расчета значений потенциала межатомного взаимодействия.(2ч.)[1,2,8,9]
3. Разработать программные компоненты для проведения моделирования процесса структурного фазового перехода методом Монте-Карло.(2ч.)[1,2,8,9]
4. Разработать программные компоненты для проведения моделирования процесса структурного фазового перехода методом молекулярной динамики.(2ч.)[1,2,8,9]

Самостоятельная работа (84ч.)

1. Подготовка к экзамену(9ч.) [2,3,4,8,9]
2. Изучение литературных источников(28ч.) [4,7,8,9] Изучение учебной и научной литературы. Анализ результатов исследовательских работ других авторов. Подготовка статьи с обзором проблем научной тематики.
3. Подготовка к защите лабораторных работ(16ч.) [2,4,8,9] Разработка программных компонентов для проведения исследовательских работ.
4. Подготовка к практическим занятиям(16ч.)[1,3,7]
5. Выполнения письменной контрольной работы (15ч.) [1,2,4,8] В форме подготовки статьи по заданной тематике

5. Перечень учебно-методического обеспечения самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Для каждого обучающегося обеспечен индивидуальный неограниченный доступ к электронно-библиотечным системам: Лань, Университетская библиотека он-лайн, электронной библиотеке АлтГТУ и к электронной информационно-образовательной среде:

1. Дудник Е.А. Компьютерное моделирование структурно-энергетических превращений в двумерном кристалле [Электр. ресурс]: Монография /Е.А. Дудник, М.Д. Старостенков, 2005.-233с.(26 экз.)

6. Перечень учебной литературы

6.1. Основная литература

2. Зубкова, Т. М. Технология разработки программного обеспечения : учебное пособие / Т. М. Зубкова. — Оренбург : Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2017. — 469 с. — ISBN 978-5-7410-1785-2. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <http://www.iprbookshop.ru/78846.html> (дата обращения: 05.02.2021). — Режим доступа: для авторизир. пользователей

3. Старовиков, М. И. Введение в экспериментальную физику : учебное

пособие / М. И. Старовиков. — Санкт-Петербург : Лань, 2008. — 240 с. — ISBN 978-5-8114-0862-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/reader/book/379/#233> (дата обращения: 28.01.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

4. Орлов А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах : Учеб. пособие для вузов по спец. "Физика металлов" М.: Высш. шк., 1983. — 144с. (3экз.)

6.2. Дополнительная литература

5. Епифанов, Г. И. Физика твердого тела : учебное пособие / Г. И. Епифанов. — 4-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 288 с. — ISBN 978-5-8114-1001-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/2023> (дата обращения: 28.01.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

6. 21Кривоглаз, М.А. Теория упорядочивающихся сплавов/ М.А. Кривоглаз, А.А. Смирнов. - М.: Физматгиз, 1958. - 388 с. (1 экз.)

7. Иверонова, В.И. Ближний порядок в твердых растворах/ В.И. Иверонова, А.А. Кацнельсон. - М.: Наука , 1977. - 256с. (2 экз.)

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

8. <http://www.mks-phys.ru>

9. <https://nsportal.ru/vu/shkola/fizika/primeneniye-kompyuternykh-tekhnologii-na-urokakh-fiziki/lektsiya-%E2%84%963-modelirovanie-fi> - Виртуальный университет образовательной социальной сети

10. Стивенс, Р. Delphi. Готовые алгоритмы : учебное пособие / Р. Стивенс. — Москва : ДМК Пресс, 2007. — 384 с. — ISBN 5-94074-106-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/1234> (дата обращения: 05.02.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

8. Фонд оценочных материалов для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Содержание промежуточной аттестации раскрывается в комплекте контролирующих материалов, предназначенных для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, которые хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном виде и в ЭИОС.

Фонд оценочных материалов (ФОМ) по дисциплине представлен в приложении А.

9. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Для успешного освоения дисциплины используются ресурсы электронной информационно-образовательной среды, образовательные интернет-порталы, глобальная компьютерная сеть Интернет. В процессе изучения дисциплины происходит интерактивное взаимодействие обучающегося с преподавателем через личный кабинет студента.

№пп	Используемое программное обеспечение
1	Dev-C++
2	LAMMPS Molecular Dynamics Simulator
3	Lazarus
4	LibreOffice
5	Python
6	Windows
7	Антивирус Kaspersky

№пп	Используемые профессиональные базы данных и информационные справочные системы
1	Бесплатная электронная библиотека онлайн "Единое окно к образовательным ресурсам" для студентов и преподавателей; каталог ссылок на образовательные интернет-ресурсы (http://Window.edu.ru)
2	Национальная электронная библиотека (НЭБ) — свободный доступ читателей к фондам российских библиотек. Содержит коллекции оцифрованных документов (как открытого доступа, так и ограниченных авторским правом), а также каталог изданий, хранящихся в библиотеках России. (http://нэб.рф/)

10. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы
учебные аудитории для проведения учебных занятий
помещения для самостоятельной работы

Материально-техническое обеспечение и организация образовательного процесса по дисциплине для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с «Положением об обучении инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья».

ПРИЛОЖЕНИЕ А

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ «Компьютерное моделирование физических процессов»

1. Перечень оценочных средств для компетенций, формируемых в результате освоения дисциплины

Код контролируемой компетенции	Способ оценивания	Оценочное средство
ПК-15: Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	Экзамен	Комплект контролирующих материалов для

Код контролируемой компетенции	Способ оценивания	Оценочное средство
		экзамена

2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания

Оцениваемые компетенции представлены в разделе «Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций» рабочей программы дисциплины «Компьютерное моделирование физических процессов».

При оценивании сформированности компетенций по дисциплине «Компьютерное моделирование физических процессов» используется 100-балльная шкала.

Критерий	Оценка по 100-балльной шкале	Оценка по традиционной шкале
Студент освоил изучаемый материал (основной и дополнительный), системно и грамотно излагает его, осуществляет полное и правильное выполнение заданий в соответствии с индикаторами достижения компетенций, способен ответить на дополнительные вопросы.	75-100	<i>Отлично</i>
Студент освоил изучаемый материал, осуществляет выполнение заданий в соответствии с индикаторами достижения компетенций с не принципиальными ошибками.	50-74	<i>Хорошо</i>
Студент демонстрирует освоение только основного материала, при выполнении заданий в соответствии с индикаторами достижения компетенций допускает отдельные ошибки, не способен систематизировать материал и делать выводы.	25-49	<i>Удовлетворительно</i>
Студент не освоил основное содержание изучаемого материала, задания в соответствии с индикаторами достижения компетенций не выполнены или выполнены неверно.	<25	<i>Неудовлетворительно</i>

3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки уровня достижения компетенций в соответствии с индикаторами

1. Подготовка статьи с описанием информационных и математических процессов в 2D модели

Компетенция	Индикатор достижения компетенции
ПК-15 Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	ПК-15.1 Подготавливает статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации

1. Для подготовки статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации: Опишите физическую модель компьютерного эксперимента для исследования процессов, происходящих на атомном уровне. (ПК-15.1)
2. Для подготовки статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации: Опишите метод молекулярной динамики для описания процесса межатомного взаимодействия в двумерном кристалле гексагональной решетки. (ПК-15.1)
3. Для подготовки статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации: опишите метод Монте-Карло для структурных превращений в двумерном кристалле гексагональной решетки бинарного сплава. (ПК-15.1)

2. Разработка компонента в 2D модели

Компетенция	Индикатор достижения компетенции
ПК-15 Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	ПК-15.2 Разрабатывает программные компоненты для проведения исследовательских работ

1. Разработайте программную компоненту для визуализации 3D кристалла с гранцентрированной кубической решеткой.
2. Разработайте программную компоненту для построения графика зависимости потенциальной функции межатомного взаимодействия Леннарда-Джонса в зависимости от расстояний между атомами:

$$\varphi(r) = -\frac{A}{r^4} + \frac{B}{r^8} + Cr + D.$$

3. Разработайте программную компоненту для расчета энергии для атомной плоскости гранцентрированной решетки Al с индексами Миллера [111].
4. Разработайте программную компоненту для диссипации энергии в кристалле.
5. Разработайте программную компоненту для расчета энергии дефекта в кристалле с точечными дефектами замещения.

3. Подготовка статьи с описанием информационных и математических процессов в 3D модели.

Компетенция	Индикатор достижения компетенции
ПК-15 Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	ПК-15.1 Подготавливает статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации

1. Для подготовки статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации: опишите методику проведения компьютерного эксперимента для исследования влияния температуры на энергетические характеристики системы: расчет потенциальной энергии, кинетической энергии в 2D кристалле. (ПК-15.1)
2. Для подготовки статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации: опишите методику проведения компьютерного эксперимента для исследования влияния концентрации вакансий на энергетические характеристики системы: расчет потенциальной энергии, кинетической энергии в 2D кристалле. (ПК-15.1)

4. Разработка программных компонентов для проведения исследовательских работ в 3D модели

Компетенция	Индикатор достижения компетенции
ПК-15 Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	ПК-15.2 Разрабатывает программные компоненты для проведения исследовательских работ

1. Разработайте программную компоненту для визуализации 3D кристалла с гранцентрированной кубической решеткой. (ПК-15.2)
2. Разработайте программную компоненту для расчета сила взаимодействия атомов на границе в 3D кристалле для метода молекулярной динамики. (ПК-15.2)
3. Разработайте программную компоненту для расчета кинетической энергии 3D кристалла Al. (ПК-15.2)

7. Лабораторный практикум

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 4

Темы: Твердотельное моделирование

Цель работы:

Методом компьютерного моделирования исследуется кинетика процесса разупорядочения в двумерном кристалле сверхструктуры L_{12} , представляющим блок, состоящий из 10^5 атомов плоскости $\{111\}$ ГЦК решетки.

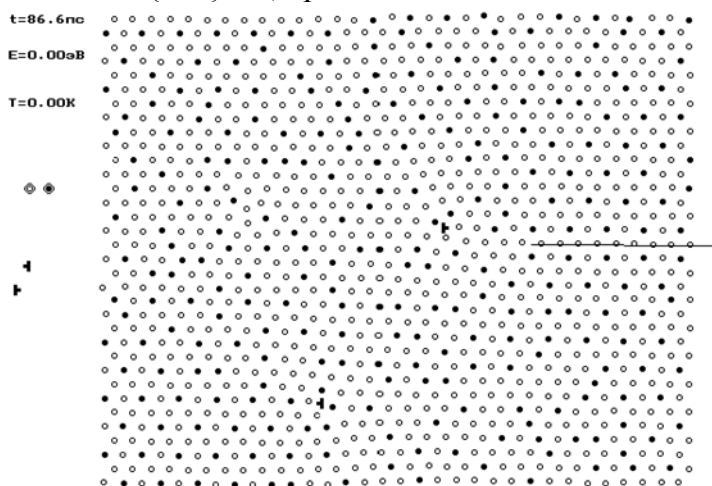


Рисунок 3.1

В качестве модельных сплавов рассматриваются - Ni_3Al и Cu_3Au . Атомы находятся в узлах двумерной гексагональной кристаллической решетки. Взаимодействия между атомами в кристаллах заданы наборами потенциальных функций Морза:

$$\varphi(r) = D \beta e^{-\alpha \cdot r} \left[\beta e^{-\alpha \cdot r} - 2 \right], \quad (1)$$

где r – расстояние между атомами, α, β, D – экспериментальные параметры,

Указанные параметры α, β, D были получены из экспериментальных данных и апробированы на расчете структур и энергетических свойств плоских дефектов [7]. Результаты экспериментов расчета энергетических характеристик плоских дефектов, расположенных в плотноупакованных атомных плоскостях, дают хорошую согласованность с экспериментом [8-9]. Радиус взаимодействия между атомами распространялся до восьмого соседства (200нм). Радиус достаточно большой, хотя с увеличением расстояния между атомами значение энергии связи падает по экспоненциальному закону и равно нулю для атомов находящихся на расстоянии, превышающем радиус пятой координационной сферы. Однако больший радиус взаимодействия позволяет неявно учесть многочастичное взаимодействие атомов и плотность кластера, ограниченного заданным радиусом.

Исследования структуры и расчет основных параметров процесса упорядочения проводились методом молекулярной динамики. Начальная конфигурация расположения атомов соответствовала упорядоченному расположению атомов в кристаллической решетке $x_{ij}(0), y_{ij}(0)$, где $i, j=1, 2, \dots, N$ (i, j – номер узла двумерной решетки). Начальные скорости атомов задавались равными наиболее вероятной скорости (ϑ) по распределения Больцмана по скоростям в следующем виде:

$$v_i^0(0) = \sqrt{\frac{4k_B T}{m_i}}, \quad (2)$$

где k_B – постоянная Больцмана, T – температура, m – масса атома.

Метод молекулярной динамики позволяет моделировать движение атомов в процессе их взаимодействия друг с другом в единицу времени. Сила взаимодействия между двумя атомами задается в виде:

$$F_{\mu}(r) = -\frac{d\varphi(r)}{dr}, \quad (3)$$

где $\varphi(r)$ – парный межатомный потенциал, r – расстояние между атомами.

Движение атомов описывалось с помощью уравнений динамики Ньютона:

$$\begin{aligned} \frac{dx_j}{dt} &= v_{jx}; & \frac{dy_j}{dt} &= v_{jy}; \\ \frac{dv_{jx}}{dt} &= \frac{F_{jx}}{m}; & \frac{dv_{jy}}{dt} &= \frac{F_{jy}}{m}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $j=1, N$, N – количество атомов; $v_{jx}, v_{jy}, F_{jx}, F_{jy}$ – соответствуют проекциям величин на оси прямоугольных декартовых координат Ox и Oy . Решается задача Коши с помощью численных методов. На границе расчетного блока на равнодействующую сил накладываются граничные периодические условия:

$$\begin{aligned} F_{jx}(x(t), y(t)) &= F_{jx}(x(t) + L, y(t)); \\ F_{jy}(x(t), y(t)) &= F_{jy}(x(t), y(t) + H), \end{aligned} \quad (5)$$

где L, H – длина и высота расчетного блока. Использование периодических условий позволяет имитировать бесконечную протяженность кристалла в рассматриваемом направлении. Данная задача не может быть решена в общем виде, для получения конкретных частных решений применяется метод центральных конечных разностей. Система (4) может быть приведена к виду:

$$\begin{aligned} x_j(t + \Delta t) &= x_j(t) + \Delta t v_{jx}(t + \Delta t/2); \\ y_j(t + \Delta t) &= y_j(t) + \Delta t v_{jy}(t + \Delta t/2); \\ v_{jx}(t + \Delta t) &= v_{jx}(t - \Delta t/2) + \Delta t \cdot \frac{F_{jx}(t)}{m}; \\ v_{jy}(t + \Delta t) &= v_{jy}(t - \Delta t/2) + \Delta t \cdot \frac{F_{jy}(t)}{m}, \end{aligned} \quad (6)$$

где Δt – шаг интегрирования. Формулы являются рекуррентными соотношениями для нахождения позиций и скоростей всех подвижных атомов в момент времени $t + \Delta t/2$ по позициям и скоростям атомов в моменты времени t и $t - \Delta t/2$.

Энергия системы записывается в виде:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \varphi(|r_i(t) - r_j(t)|), \quad (7)$$

где r_i – радиус-вектор атома i .

Нагрев и охлаждение кристалла проводились путем ступенчатого изменения температуры с шагом 300К. Для определения температур активации точечных дефектов температурный интервал уменьшали до 50К. Температура контролировалась по значению кинетической энергии. Масса атомов.

mass2=26.9815 ат.м.; { AL }

mass1=58.71 ат.м.; { масса Ni }

ma1=196.97 ат.м.; { Au }

ma2=63.55 ат.м.; { масса Cu }

Параметры парных потенциальных функций Морзе

a0:=3.57; экспериментальные значения

Связь Ni-Ni: ani:=1.36605(1/ангстрем);bni:=41.0494;dni:=0.470513(эВ);

Связь Al-Al: aal:=1.02658(1/ангстрем);bal:=27.4979;dal:=0.318004(эВ);

Связь Al-Ni: anial:=1.16808(1/ангстрем);bnial:=27.1260;dnial:=0.435327(эВ);

a0:=3.74; экспериментальные значения

Связь Cu-Cu: acu:=1.28245(1/ангстрем);bcu:=36.7655;dcu:=0.361103(эВ);;

Связь Au-Au: aau:=1.40363(1/ангстрем);bau:=72.0919;dau:=0.45244(эВ);

Связь Cu-Au: acuau:=1.33723(1/ангстрем);bcuau:=49.2875;dcuau:=0.435327(эВ);;

1(эВ)=(ангстрем в квадрате)/(пс в квадрате)*9636*ат.м.

Далее программный вариант, расчета потенциала, силы, учет периодичности границ, решение системы уравнения численным методом Эйлера.

Силу вычисляем через потенциалы Морзе, находим скорости и затем координаты.

Задание:

1. Построение двумерной г.ц.к. решетки (111). Расчет энергии кристалла.
2. Построение трехмерной кристаллической решетки, с возможностью масштабирования и поворота объекта.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №5

Тема: Метод молекулярной динамики

Задание:

1. Моделирование движения атомов на плоскости, при температуре T=0К.
2. Моделирование движения атомов на плоскости, при температуре T=100К.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №6

Тема: Метод Монте-Карло в модельном сплаве

Вычислительная модель метода Монте-Карло

Если обычно в качестве критерия достижения равновесия рассматривается условие достижения экстремума какой-либо макроскопической характеристики, то в данном подходе точное динамическое поведение системы заменяется дискретными состояниями, где один шаг итерации соответствует одному акту самодиффузии атомов по вакансионному механизму. При этом на каждом шаге итерации рассчитывается вероятность того, что один из расположенных вблизи вакантного узла атомов займет его место, причем вероятность перескока атома i в вакантный узел j решетки экспоненциально зависит от температуры:

$$P_{ij} = A \cdot \exp\left(-(\Delta E_{\max} - \Delta E_v^{ij}) / kT\right),$$

где k – постоянная Больцмана, T – температура, A – нормировочный множитель, обеспечивающий выполнение условия (сумма вероятностей перескоков атомов, расположенных на расстоянии первой и

второй координационной сферы от вакантного узла, равна единице, $\sum_{ij}^n P_{ij} = 1$, где n – число атомов на

первой координационной сфере от вакансии). Величина высвобождаемой (затрачиваемой) энергии оценивается для каждого атома i , окружающего вакансию j на первой координационной сфере, она равна разности энергии связи атома i в положении вакантного узла и энергии связи атома i в положении до перескока: $\Delta E_v^{ij} = E_k^{ij} - E_n^{ij}$. В результате из всех выбирается максимальное, обозначаемое как значение

ΔE_{\max} .

Задание:

1. Моделирование движения атомов на плоскости, при температуре $T=200K$.
2. Построения графика зависимости энергии от времени.

Методика проведения компьютерного эксперимента

Проведение компьютерного эксперимента состоит из трех основных шагов: инициализация объекта исследования, достижения равновесного состояния и расчет интересующих характеристик.

Первом шаге моделирования заключается в определении начальных положений атомов в узлах кристаллической решетки и задании начальных скоростей полученных из Максвелловского - Больцмановского распределения. Точный выбор начальных условий не имеет значения, поскольку система все равно «забудет» свое начальное состояние.

На втором шаге моделирования при использовании одного из методов получение новых положений атомов во времени и пространстве система релаксирует в равновесное состояние. Положение является равновесным, если система релаксировала к определенным средним значениям энергии.

Состояние сплава считалось равновесным и устойчивым, если, характеризующие систему параметры (энергия, параметры порядка, энтропия) оставались неизменными сколь угодно долго, при этом система не могла выйти из этого состояния без внешних воздействий.

На последнем шаге моделирования производится расчет интересующих параметров и характеристик.

Шаг 1. Инициализация координат атомов структуры модельного сплава. Определение начальных и граничных условий для исходной конфигурации моделирования процесса.

В качестве объектов исследования были выбраны модельные бинарные сплавы системы Cu-Au, Ni-Al. Сплавы обладают ГЦК решеткой, причем сплав стехиометрического состава в полностью упорядоченном состоянии имеет сверхструктуру $L1_2$ либо $L1_0$, а в неупорядоченном – структуру $A1$.

В качестве объектов исследования были выбраны модельные бинарные сплавы системы Ni-Al. Сплавы обладают ГЦК решеткой, причем сплав стехиометрического состава в полностью упорядоченном состоянии имеет сверхструктуру $L1_2$ (рис. 1,а) либо $L1_0$ (рис. 1,б).

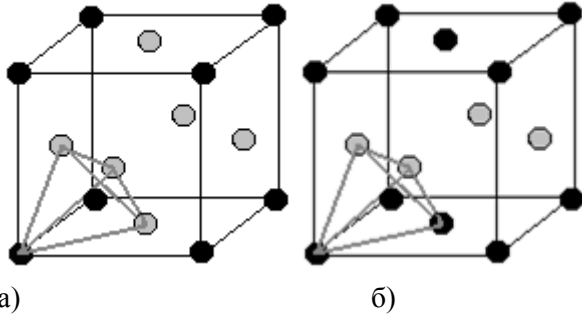


Рис.1. Распределение атомов в соответствии со сверхструктурой $L1_2$

Трехмерная гранцентрированная решетка состоит из N атомов ($4n \times 4m \times 4d$), задается путем трансляции элементарной ячейки по осям абсцисс, ординат и аппликат. Значение координат узлов исходной элементарной ячейки, состоящей из 4 атомов, соответственно равны:

$$\begin{aligned} (x_0^1, y_0^1, z_0^1) &= (0,0,0), \\ (x_0^2, y_0^2, z_0^2) &= (1,1,0), \\ (x_0^3, y_0^3, z_0^3) &= (0,1,1), \\ (x_0^4, y_0^4, z_0^4) &= (1,0,1), \end{aligned} ;$$

Координаты атомов заданы в виде

$$x_i = x_0^l + i \cdot a_x, \quad \text{при } i = 0, \dots, n,$$

$$y_j = y_0^l + j \cdot a_y, \quad \text{при } j = 0, \dots, m,$$

$$z_s = z_0^l + s \cdot a_z, \quad \text{при } s = 0, \dots, d,$$

$$\text{где } l = 1, 2, 3, 4.$$

Затем проводится масштабирование координат атомов в соответствии с минимальным межатомным расстоянием $r_0 = \frac{a_0}{\sqrt{2}}$.

Сорта атомов задаются в соответствии с заданной концентрацией компонент $CA=3/4$, $CA=1/4$. В вершинах куба располагаются атомы Al , в центре граней атомы Ni , период чередования сортов атомов в элементарной ячейке равен 4.

Задание точных начальных скоростей атомов не имеет значения, поскольку система все равно «забудет свое начальное состояние» []. Для определенности значение скоростей атомов полагается равной наиболее вероятной скорости по распределению Максвелла-Больцмана. Начальные скорости в зависимости от температуры задаются по формуле:

$$|v_i| = \sqrt{\frac{2k_b T}{m_i}}$$

где k_b – постоянная Больцмана, T – температура. Направление скорости атома задается случайным образом. После запуска метода молекулярной динамики скорости перераспределяются согласно закону распределения скоростей Максвелла.

Направление скоростей рандомизировано, углы α , β выбираются случайным образом:

$$v_x = \cos(\alpha) \sin(\beta),$$

$$v_y = \sin(\alpha) \sin(\beta),$$

$$v_z = \cos(\beta)$$

где v_x, v_y, v_z - проекции вектора скорости атома.

Однако надо обеспечить равенство суммарного импульса системы нулю, чтобы расчетный блок не перемещался. Начальные положения атомов задают вклад потенциальной энергии в полную энергию системы, а скорости определяют вклад кинетической энергии.

Для описания межатомного взаимодействия выбирается потенциал и радиус обрезания см.п.2.2. В зависимости от поставленной задачи компьютерного эксперимента определяются граничные условия и вводятся исследуемые структурные дефекты в исходную конфигурацию.

Шаг 2. Получения равновесного состояния системы.

На этом этапе в соответствии с поставленной задачей выбирается метод для расчета эволюции системы вдоль траектории с постоянной энергией либо с постоянной температурой в фазовом пространстве.

В случае выбора метода молекулярной динамики нужно провести первоначальную исходную конфигурацию в равновесное состояние при температуре 0К.

Релаксация системы достигается при помощи следующего алгоритма:

1. Выполняется определенное число шагов интегрированием уравнений движения.
2. На временном шаге, при котором достигается максимальное значение кинетической энергии, энергия отводится из системы при помощи нормировки скоростей.
3. Если после выполнения нескольких шагов происходит скачок энергии системы, и если значения кинетической и потенциальной нестабильны, переходим на шаг1 и проводим перенормировку скоростей атомов.

Путем интегрирования уравнений движения необходимо определить оптимальный временной шаг, при котором система будет сохранять равновесие, потому что сильно маленький итерационный шаг увеличивает время счета, слишком большой шаг дает большую погрешность.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1. Примеры реализации программ

1. Задание: построить кривую с использованием радиуса кривизны. Нужно построить кривую $x=f_1(t)$, $y=f_2(t)$, $0 \leq t \leq 2\pi$, заданную в параметрическом виде ($dt=0.01$ – шаг изменения аргумента).

Пример программы построения кривой к лабораторной №1

Procedure krub;

begin

t:=0; x:=f1(t); y:=f2(t);

moveto(xscr(x), yscr(y)); { Установить курсор в начальную точку}

repeat

t:=t+dt

x:=f1(t); y:=f2(t);

lineto(xscr(x),yscr(y));

until t>=2*PI;

end;

Пример программы построения изображения функции двух переменных, с помощью координационных линий ($y=const$):

uses crt, graph;

const

otstup=30;

dy=4;

dx=2;

w=3.1459/180;

ph=45*w;

ps=45*w;

e:array [1..2,1..3] of real =(cos(ph),sin(ps),0,sin(ps)*sin(ph),-sin(ps)*cos(ph),cos(ps));

var

z,x1,x,y:real;

h,hx,xc,yc,x1,x2,y1,y2:integer;

```

z2,z1:integer;
begin
{ инициализация графического режима}
xc:=getmaxx div 2;
yc:=getmaxy div 2 + 2*otstup;
{определение масштабных коэффициентов}
h:=yc div 3;
y:=-h;
xl:=xc div 2;
repeat
{получение параллельных прямых при фиксировании yi }
x:=-xl;
z:=h*sin(w*sqrt(x*x+y*y));
{проектирование на OXY}
x1:=round(x*e[1,1]+y*e[1,2]+z*e[1,3]);
z1:=round(x*e[2,1]+z*e[2,3]-y*e[2,2]);
x:=x+dx;
repeat
z:=h*sin(w*sqrt(x*x+y*y));
x2:=round(x+y);
z2:=round(z-y+x);
line(x1+xc,yc-z1,x2+xc,yc-z2);
x1:=x2;
z1:=z2;
x:=x+dx;
until x>xl;
y:=y+dy;
until y>h;
readln;
closegraph;
end.

```

Результаты работы программы, поверхность, состоящая из координатных линий при фиксированных значениях y_k функции $f(x, y) = \sin(\sqrt{x^2 + y^2})$.

Приложение 2. Минимальный код программы для использования OpenGL в программе на Delphi.

В приложении приводятся три варианта программ, позволяющих использовать библиотеку OpenGL для графического вывода. Примеры взяты с диска к книге Краснова М.В. «OpenGL в проектах Delphi».

1) Оконное приложение.

(часть 1, пример 20)

```

{*****}
program GLmin;
uses
  Forms,
  Unit1 in 'Unit1.pas' {frmGL};
{$R *.RES}
begin
  Application.Initialize;
  Application.CreateForm(TfrmGL, frmGL);
  Application.Run;
end.
{*****}
unit Unit1;
interface
uses

```

```

Windows, Messages, Forms, Classes, Controls, ExtCtrls, ComCtrls,
StdCtrls, Dialogs, SysUtils,
OpenGL;
type
  TfrmGL = class(TForm)
    procedure FormCreate(Sender: TObject);
    procedure FormPaint(Sender: TObject);
    procedure FormDestroy(Sender: TObject);
  private
    hrc: HGLRC; // ссылка на контекст воспроизведения
  end;
var
  frmGL: TfrmGL;

implementation
  {$R *.DFM}
  {=====Рисование картинки}
  procedure TfrmGL.FormPaint(Sender: TObject);
  begin
    wglMakeCurrent(Canvas.Handle, hrc);
    glClearColor (0.5, 0.5, 0.75, 1.0); // цвет фона
    glClear (GL_COLOR_BUFFER_BIT); // очистка буфера цвета
    //glBegin(GL_LINES);
    // glVertex(-0.5,-0.5);
    // glVertex(0.5,0.5);
    //glEnd;
    wglMakeCurrent (0, 0);
  end;
  {=====Формат пикселя}
  procedure SetDCPixelFormat (hdc : HDC);
  var
    pfd : TPixelFormatDescriptor;
    nPixelFormat : Integer;
  begin
    FillChar (pfd, SizeOf (pfd), 0);
    nPixelFormat := ChoosePixelFormat (hdc, @pfd);
    SetPixelFormat (hdc, nPixelFormat, @pfd);
  end;
  {=====Создание формы}
  procedure TfrmGL.FormCreate(Sender: TObject);
  begin
    SetDCPixelFormat(Canvas.Handle);
    hrc := wglCreateContext(Canvas.Handle);
  end;
  {=====Конец работы приложения}
  procedure TfrmGL.FormDestroy(Sender: TObject);
  begin
    wglDeleteContext(hrc);
  end;
  end.
  {*****}

```

Приложение 3. Минимальный код программы OpenGL на C++.

```
#include <windows.h> // Заголовочный файл для Windows
```

```

#include <gl\gl.h>           // Заголовочный файл для OpenGL32 библиотеки
#include <gl\glu.h>         // Заголовочный файл для GLu32 библиотеки
#include <gl\glaux.h>       // Заголовочный файл для GLaux библиотеки
    static HGLRC hRC;      // Постоянный контекст рендеринга
static HDC hDC;           // Приватный контекст устройства GDI
    BOOL     keys[256];    // Массив для процедуры обработки клавиатуры
    GLvoid InitGL(GLsizei Width, GLsizei Height) // Вызвать после создания
// окна GL
{
    glClearColor(0.0f, 0.0f, 0.0f, 0.0f); // Очистка экрана в черный цвет
}
    GLvoid ReSizeGLScene(GLsizei Width, GLsizei Height)
{
    if (Height==0)        // Предотвращение деления на ноль,
//если окно слишком мало
        Height=1;

        glViewport(0, 0, Width, Height); // Сброс текущей области вывода
}
    GLvoid DrawGLScene(GLvoid)
{
    glClear(GL_COLOR_BUFFER_BIT); // Очистка экрана
// Здесь создается рисунок
    glPointSize(2);
    glBegin(GL_POINTS);
        glColor3f(1,0,0);
        glVertex2f(-0.45,-0.4); // первая точка

        glColor3f(0,1,0);
        glVertex2f(0.4,0.4); // вторая точка

        glColor3f(0,0,1); //третья точка
        glVertex2f(-0.35,0.4);
    glEnd();

    glLineWidth(3);

    glBegin(GL_LINE_STRIP); // ломаная линия
        glColor3f(0.7,0.3,0);
        glVertex2f(-0.10,0);
        glVertex2f(1,0.13);
        glColor3f(0,1,0);
        glVertex2f(-0.15,0.33);
        glColor3f(0,0,1);
        glVertex2f(-0.12,0.35);
    glEnd();
// здесь закончилось создание рисунка
}

LRESULT CALLBACK WndProc(   HWND hWnd,
                            UINT message,
                            WPARAM wParam,
                            LPARAM lParam)
{
    RECT Screen;           // используется позднее для размеров окна
    GLuint PixelFormat;

```



```

static PIXELFORMATDESCRIPTOR pfd=
{
    sizeof(PIXELFORMATDESCRIPTOR),    // Размер этой структуры
    1,                                // Номер версии (?)
    PFD_DRAW_TO_WINDOW |              // Формат для Окна
    PFD_SUPPORT_OPENGL |              // Формат для OpenGL
    PFD_DOUBLEBUFFER,                 // Формат для двойного буфера
    PFD_TYPE_RGBA,                     // Требуется RGBA формат
    16,                                // Выбор 16 бит глубины цвета
    0, 0, 0, 0, 0, 0,                 // Игнорирование цветовых битов (?)
    0,                                  // нет буфера прозрачности
    0,                                  // Сдвиговой бит игнорируется (?)
    0,                                  // Нет буфера аккумуляции
    0, 0, 0, 0,                       // Биты аккумуляции игнорируются (?)
    16,                                // 16 битный Z-буфер (буфер глубины)
    0,                                  // Нет буфера траффарета
    0,                                  // Нет вспомогательных буферов (?)
    PFD_MAIN_PLANE,                   // Главный слой рисования
    0,                                  // Резерв (?)
    0, 0, 0                            // Маски слоя игнорируются (?)
};
switch (message) // Тип сообщения
{
case WM_CREATE:
    hDC = GetDC(hWnd); // Получить контекст устройства для окна
    PixelFormat = ChoosePixelFormat(hDC, &pfd);
    // Найти ближайшее совпадение для нашего формата пикселей
if (!PixelFormat)
    {
        MessageBox(0,"Can't Find A SuitablePixelFormat.", "Error", MB_OK|MB_ICONERROR);
        PostQuitMessage(0);
        // Это сообщение говорит, что программа должна завершиться
        break; // Предотвращение повтора кода
    }
if(!SetPixelFormat(hDC,PixelFormat,&pfd))
    {
        MessageBox(0,"Can't Set ThePixelFormat.", "Error", MB_OK|MB_ICONERROR);
        PostQuitMessage(0);
        break;
    }
hRC = wglCreateContext(hDC);
if(!hRC)
    {
        MessageBox(0,
            "Can't Create A GLRenderingContext.",
            "Error", MB_OK|MB_ICONERROR);
        PostQuitMessage(0);
        break;
    }
if(!wglMakeCurrent(hDC, hRC))
    {
        MessageBox(0,"Can't activate GLRC.", "Error", MB_OK|MB_ICONERROR);
        PostQuitMessage(0);
        break;
    }
GetClientRect(hWnd, &Screen);

```

```

        InitGL(Screen.right, Screen.bottom);
        break;
case WM_DESTROY:
    case WM_CLOSE:
        ChangeDisplaySettings(NULL, 0);
        wglMakeCurrent(hDC, NULL);
        wglDeleteContext(hRC);
        ReleaseDC(hWnd, hDC);
        PostQuitMessage(0);
        break;
case WM_KEYDOWN:
    keys[wParam] = TRUE;
    break;

case WM_KEYUP:
    keys[wParam] = FALSE;
    break;
case WM_SIZE:
    ReSizeGLScene(LOWORD(lParam), HIWORD(lParam));
    break;
default:
    return (DefWindowProc(hWnd, message, wParam, lParam));
    }
    return (0);
}
int WINAPI WinMain(HINSTANCE hInstance, HINSTANCE hPrevInstance,
    LPSTR lpCmdLine, int nCmdShow)
{
    MSG        msg; // Структура сообщения Windows
    WNDCLASS   wc; // Структура класса Windows для установки типа окна
    HWND       hWnd; // Сохранение дескриптора окна
    wc.style    = CS_HREDRAW | CS_VREDRAW | CS_OWNDC;
    wc.lpfnWndProc    = (WNDPROC) WndProc;
    wc.cbClsExtra     = 0;
    wc.cbWndExtra     = 0;
    wc.hInstance     = hInstance;
    wc.hIcon          = NULL;
    wc.hCursor        = LoadCursor(NULL, IDC_ARROW);
    wc.hbrBackground = NULL;
    wc.lpszMenuName   = NULL;
    wc.lpszClassName  = "OpenGL WinClass";
    if(!RegisterClass(&wc))
    {
        MessageBox(0, "Failed To Register The WindowClass.",
"Error", MB_OK|MB_ICONERROR);
        return FALSE;
    }
    hWnd = CreateWindow("OpenGL WinClass",
        "First OpenGL program", // Заголовок сверху окна

        WS_POPUP |
        WS_CLIPCHILDREN |
        WS_CLIPSIBLINGS,
    0, 0, // Позиция окна на экране
    640, 480, // Ширина и высота окна
    NULL,

```

```

        NULL,
        hInstance,
        NULL);
if(!hWnd)
{
    MessageBox(0,"Window Creation Error.,"Error",MB_OK|MB_ICONERROR);
    return FALSE;
}
if(!hWnd)
{
    MessageBox(0,"Window Creation Error.,"Error",MB_OK|MB_ICONERROR);
    return FALSE;
}

ShowWindow(hWnd, SW_SHOW);
UpdateWindow(hWnd);
SetFocus(hWnd);
while (1)
{
    // Обработка всех сообщений
    while (PeekMessage(&msg, NULL, 0, 0, PM_NOREMOVE))
    {
        if (GetMessage(&msg, NULL, 0, 0))
        {
            TranslateMessage(&msg);
            DispatchMessage(&msg);
        }
        else
        {
            return TRUE;
        }
    }

    DrawGLScene(); // Нарисовать сцену
    SwapBuffers(hdc); // Переключить буфер экрана
    if (keys[VK_ESCAPE]) SendMessage(hWnd,WM_CLOSE,0,0); // Если ESC - выйти
}

```

ПРИЛОЖЕНИЕ 4. МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

```

function sign(sd1,sd2:double):integer;
begin
    if sd2-sd1>0 then sign:=1
    else sign:=-1;
end;

```

```

procedure power(r1:extended;ii:integer;var ff,fp:extended);
var
    ee:extended;
begin
    if ii=1 then
        begin
            ee:=exp(1.36605*r1);

```

```

ff:=2*0.470513*41.0494*1.36605/ee*(41.0494/ee-1); (считаю силу)
fp:=0.470513*41.0494/ee*(41.0494/ee-2); (считаю потенциал)
end
else
if ii=2 then begin
ee:=exp(1.02658*r1);
ff:=2*0.318004*27.4979*1.02658/ee*(27.4979/ee-1);
fp:=0.318004*27.4979/ee*(27.4979/ee-2);
end;
if ii=3 then begin
ee:=exp(1.22757*r1);
ff:=2*0.495026*27.5044*1.22757/ee*(27.5044/ee-1);
fp:=0.495026*27.5044/ee*(27.5044/ee-2);

end;

end;

end;
procedure pw; (учет граничных условий)
var ii:integer;
begin
x11:=xyz^[k].x-xyz^[i].x;
y11:=xyz^[k].y-xyz^[i].y;
z11:=xyz^[k].z-xyz^[i].z;
r:=sqrt(sqrt(x11)+sqrt(y11)+sqrt(z11));
if (r<rd) and (r>r0) then
begin
m:=round((r-r0)/hf); p1:=p1+1;
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=1) then
ii:=1 else
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=2) then
ii:=2 else
if xyz^[i].ma<>xyz^[k].ma then
ii:=3 ;
fr:=fr+p11[ii]^[m+1]; //проекция силы
fx:=fx-f11[ii]^[m+1]*x11/r;
fy:=fy-f11[ii]^[m+1]*y11/r;
fz:=fz-f11[ii]^[m+1]*z11/r;

{writeln(fl,'1*',x11:8:6,',y11:8:6,',z11:8:6,',r:8:6,',fr:8:6,',m,',f11[ii]^[m],',p1,',ii);}
{writeln(fl,'1*',',r:8:6,',m,',p11[ii]^[m+1],',ii);}

end
else
begin
x11:=lx-abs(xyz^[k].x-xyz^[i].x);
y11:=ly-abs(xyz^[k].y-xyz^[i].y);
z11:=xyz^[k].z-xyz^[i].z;
r:=sqrt(sqrt(x11)+sqrt(y11)+sqrt(z11));
if (r<rk) and (r>r0) then
begin
m:=round((r-r0)/hf); p1:=p1+1;
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=1) then

```

```

    ii:=1 else
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=2) then
    ii:=2 else
if xyz^[i].ma<>xyz^[k].ma then
    ii:=3 ;

    fr:=fr+p11[ii]^[m+1];
    fx:=fx-f11[ii]^[m+1]*x11/r*sign(xyz^[k].x,xyz^[i].x);
    fy:=fy-f11[ii]^[m+1]*y11/r*sign(xyz^[k].y,xyz^[i].y);
    fz:=fz-f11[ii]^[m+1]*z11/r;
{ writeln(fl,'2*',x11:8:6,' ',y11:8:6,' ',z11:8:6,' ',r:8:6,' ',fr:8:6,' ',m,' ',f11[ii]^[m],' ',p1,' ',ii);}
{ writeln(fl,'2*', ' ',r:8:6,' ',m,' ',p11[ii]^[m+1],' ',ii);}

    end

else
begin
y11:=xyz^[k].y-xyz^[i].y;
x11:=lx-abs(xyz^[k].x-xyz^[i].x);
z11:=xyz^[k].z-xyz^[i].z;
    r:=sqrt(sqrt(x11)+sqrt(y11)+sqrt(z11));
    if (r<rk) and (r>r0) then
        begin
            m:=round((r-r0)/hf);  p1:=p1+1;
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=1) then
    ii:=1 else
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=2) then
    ii:=2 else
if xyz^[i].ma<>xyz^[k].ma then
    ii:=3 ;

            fr:=fr+p11[ii]^[m+1];
            fx:=fx-f11[ii]^[m+1]*x11/r*sign(xyz^[k].x,xyz^[i].x);
            fy:=fy-f11[ii]^[m+1]*y11/r;
            fz:=fz-f11[ii]^[m+1]*z11/r;
{ writeln(fl,'3*',x11:8:6,' ',y11:8:6,' ',z11:8:6,' ',r:8:6,' ',fr:8:6,' ',m,' ',f11[ii]^[m],' ',p1,' ',ii);}
{ writeln(fl,'3*', ' ',r:8:6,' ',m,' ',p11[ii]^[m+1],' ',ma[k],' ',ii); }

        end
    end
else
begin
x11:=xyz^[k].x-xyz^[i].x;
y11:=ly-abs(xyz^[k].y-xyz^[i].y);
z11:=xyz^[k].z-xyz^[i].z;
    r:=sqrt(sqrt(x11)+sqrt(y11)+sqrt(z11));
    if (r<rk) and (r>r0) then
        begin
            m:=round((r-r0)/hf);  p1:=p1+1;
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=1) then
    ii:=1 else
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=2) then
    ii:=2 else

```

```

if xyz^[i].ma<>xyz^[k].ma then
  ii:=3 ;

  fr:=fr+p11[ii]^[m+1];
  fx:=fx-f11[ii]^[m+1]*x11/r;
  fy:=fy-f11[ii]^[m+1]*y11/r*sign(xyz^[k].y,xyz^[i].y);
  fz:=fz-f11[ii]^[m+1]*z11/r;
{writeln(fl,'4*',x11:8:6,' ',y11:8:6,' ',z11:8:6,' ',r:8:6,' ',fr:8:6,' ',m,' ',f11[ii]^[m],' ',p1,' ',ii);}
{writeln(fl,'4*',',r:8:6,' ',m,' ',p11[ii]^[m+1],' ',ma[k],' ',ii);}

  end
  else
  BEGIN
  x11:=xyz^[k].x-xyz^[i].x;
  y11:=xyz^[k].y-xyz^[i].y;
  z11:=lz-abs(xyz^[k].z-xyz^[i].z);
  r:=sqrt(sqr(x11)+sqr(y11)+sqr(z11));
  if (r<rk) and (r>r0) then
    begin
      m:=round((r-r0)/hf);  p1:=p1+1;
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=1) then
  ii:=1 else
  if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=2) then
    ii:=2 else
  if xyz^[i].ma<>xyz^[k].ma then
    ii:=3 ;

      fr:=fr+p11[ii]^[m+1];
      fx:=fx-f11[ii]^[m+1]*x11/r;
      fy:=fy-f11[ii]^[m+1]*y11/r;
      fz:=fz-f11[ii]^[m+1]*z11/r*sign(xyz^[k].z,xyz^[i].z);

{writeln(fl,'5*',x11:8:6,' ',y11:8:6,' ',z11:8:6,' ',r:8:6,' ',fr:8:6,' ',m,' ',f11[ii]^[m],' ',p1,' ',ii);}
{writeln(fl,'5*',',r:8:6,' ',m,' ',p11[ii]^[m+1],' ',ma[k],' ',ii); }

    end
    else
    BEGIN
  x11:=xyz^[k].x-xyz^[i].x;
  y11:=ly-abs(xyz^[k].y-xyz^[i].y);
  z11:=lz-abs(xyz^[k].z-xyz^[i].z);
  r:=sqrt(sqr(x11)+sqr(y11)+sqr(z11));
  if (r<=rk) and (r>r0) then
    begin
      m:=round((r-r0)/hf);  p1:=p1+1;
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=1) then
  ii:=1 else
  if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=2) then
    ii:=2 else
  if xyz^[i].ma<>xyz^[k].ma then
    ii:=3 ;

```

```

        fr:=fr+p11[ii]^[m+1];
        fx:=fx-f11[ii]^[m+1]*x11/r;
        fy:=fy-f11[ii]^[m+1]*y11/r*sign(xyz^[k].y,xyz^[i].y);
        fz:=fz-f11[ii]^[m+1]*z11/r*sign(xyz^[k].z,xyz^[i].z);
{ writeln(fl,'6*',x11:8:6,' ',y11:8:6,' ',z11:8:6,' ',r:8:6,' ',fr:8:6,' ',m,' ',f11[ii]^[m],' ',p1,' ',ii);}
{writeln(fl,'6*', ' ',r:8:6,' ',m,' ',p11[ii]^[m+1],' ',ma[k],' ',ii);}
        end
        else
        BEGIN
        x11:=lx-ABS(xyz^[k].x-xyz^[i].x);
        y11:=xyz^[k].y-xyz^[i].y;
        z11:=lz-abs(xyz^[k].z-xyz^[i].z);
        r:=sqrt(sqr(x11)+sqr(y11)+sqr(z11));
        if (r<rk) and (r>r0) then
        begin
        m:=round((r-r0)/hf);  p1:=p1+1;
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=1) then
        ii:=1 else
        if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=2) then
        ii:=2 else
        if xyz^[i].ma<>xyz^[k].ma then
        ii:=3 ;

        fr:=fr+p11[ii]^[m+1];
        fx:=fx-f11[ii]^[m+1]*x11/r*sign(xyz^[k].x,xyz^[i].x);
        fy:=fy-f11[ii]^[m+1]*y11/r;
        fz:=fz-f11[ii]^[m+1]*z11/r*sign(xyz^[k].z,xyz^[i].z);
{ writeln(fl,'7*',x11:8:6,' ',y11:8:6,' ',z11:8:6,' ',r:8:6,' ',fr:8:6,' ',m,' ',f11[ii]^[m],' ',p1,' ',ii);}
{  writeln(fl,'7*', ' ',r:8:6,' ',m,' ',p11[ii]^[m+1],' ',ma[k],' ',ii);}

        end
        else
        BEGIN
        x11:=lx-abs(xyz^[k].x-xyz^[i].x);
        y11:=ly-abs(xyz^[k].y-xyz^[i].y);
        z11:=lz-abs(xyz^[k].z-xyz^[i].z);
        r:=sqrt(sqr(x11)+sqr(y11)+sqr(z11));
        if (r<rk) and (r>r0) then
        begin
        m:=round((r-r0)/hf);  p1:=p1+1;
if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=1) then
        ii:=1 else
        if (xyz^[i].ma=xyz^[k].ma) and (xyz^[i].ma=2) then
        ii:=2 else
        if xyz^[i].ma<>xyz^[k].ma then
        ii:=3 ;

        fr:=fr+p11[ii]^[m+1];
        fx:=fx-f11[ii]^[m+1]*x11/r*sign(xyz^[k].x,xyz^[i].x);
        fy:=fy-f11[ii]^[m+1]*y11/r*sign(xyz^[k].y,xyz^[i].y);
        fz:=fz-f11[ii]^[m+1]*z11/r*sign(xyz^[k].z,xyz^[i].z);

```

```
{ writeln(fl,'8*',x11:8:6,',y11:8:6,',z11:8:6,',r:8:6,',fr:8:6,',m,',f11[ii]^m,',p1,',ii);}
{   writeln(fl,'8*',',r:8:6,',m,',p11[ii]^(m+1)',',ma[k]',',ii);}
```

```
    end
end;end;end;end;
```

```
    end;
end;
end;
p2:=p2+1;
end;
```

Решение системы диф.уравнений

```
{ label5.caption:='Работает';
timer1.Enabled:=true;
tk:=0; ht:=0.001; {шаг} dd:=rd; t0:=0;
vfm1:=ht*9632/4/mass1; vfm2:=ht*9632/4/mass2; {коэффициент перевода размерности}
assignfile(fl,'pysk.txt');
rewrite(fl);
{ gettime(ho,mi,sec,s100);
writeln(fl,ho,',mi,',',sec,',',s100,' ma=',ma[100]);
}
while tk<0.1 do
begin
fr:=0; p1:=0;p2:=0; ffr:=0;
for i:=1 to n1 do
begin
fx:=0;fy:=0;fz:=0;p1:=0;
j:=1;
while nn[(i-1)*100+j]<>0 do
begin
k:=nn[(i-1)*100+j];
pw;
j:=j+1;
end;
{ writeln(fl,i,',',p1,',',fr-ffr:9:5,',',fr:9:5);ffr:=fr;}
if xyz^[i].ma=1 then
begin
vxyz^[i].x:=vxyz^[i].x+vfm1*fx;
vxyz^[i].y:=vxyz^[i].y+vfm1*fy;
vxyz^[i].z:=vxyz^[i].z+vfm1*fz;
end
else
begin
vxyz^[i].x:=vxyz^[i].x+vfm2*fx;
vxyz^[i].y:=vxyz^[i].y+vfm2*fy;
vxyz^[i].z:=vxyz^[i].z+vfm2*fz;
end;
end;
for l:=1 to n1 do
begin
xyz^[l].x:=xyz^[l].x+ht*vxyz^[l].x;
xyz^[l].y:=xyz^[l].y+ht*vxyz^[l].y;
```



```
xyz^[1].z:=xyz^[1].z+ht*vxyz^[1].z;  
end;  
{pic0;}  
tk:=tk+ht; t0:=t0+1;
```

8. Методические рекомендации студентам по изучению дисциплины

Планирование и организация времени, отведенного на изучение дисциплины.

В начале семестра студент знакомится с содержанием и структурой дисциплины. Студент самостоятельно планирует свое время, опираясь на календарный график, приведенный в рабочей программе дисциплины. Все виды работ можно разделить на две группы – контактная работа и самостоятельная работа. Контактная работа может быть аудиторной, внеаудиторной, а также проводиться в электронной информационно–образовательной среде.

Контактная работа при проведении учебных занятий по дисциплине (модулю) включает в себя лекции, лабораторные работы, консультации по выполнению лабораторных работ. Консультации могут быть групповыми или индивидуальными. Контактная работа студентов по дисциплине также может содержать элементы самостоятельной работы. В этом случае она выполняется на учебных занятиях под непосредственным руководством преподавателя и по его заданию. Объем времени на контактную работу студентов регламентируется расписанием занятий.

Самостоятельная работа студентов – планируемая учебная, научно-исследовательская работа студентов, выполняемая во внеаудиторное время по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия и не регламентируется расписанием занятий.

Самостоятельная работа, которую студент организует по своему усмотрению, без непосредственного контроля со стороны преподавателя - подготовка к лекциям, практическим занятиям, контрольным работам, экзамену. В этой связи стоит подчеркнуть, что очень важно умение оптимизировать процесс сочетания этих двух частей, необходимо равномерно распределять силы по всей дистанции семестра.

Для успешного освоения материала и качественного выполнения лабораторной работы необходимо после лекции и перед лабораторной работой, повторить материал (15 – 30 минут).

Перед контрольной работой необходимо не только повторить материал по конспекту лекций, но и изучить рекомендуемую литературу по соответствующим темам.

Сценарий изучения дисциплины (последовательность действий):

1. Посещение лекций (регламентируется расписанием занятий).
2. Выполнение лабораторных работ и выполнение индивидуальных заданий (регламентируется расписанием занятий).
3. Самостоятельная внеаудиторная работа с конспектом лекций и рекомендуемой литературой, решение задач.
4. Выполнение контрольных работ.

5. Подготовка к зачету.

Рекомендации по работе с литературой.

Работа с литературой является основным методом самостоятельного овладения знаниями. Это сложный процесс, требующий выработки определенных навыков, поэтому студенту нужно обязательно научиться работать с книгой.

Осмысление литературы требует системного подхода к освоению материала. В работе с литературой системный подход предусматривает не только тщательное (при необходимости – многократное) чтение текста и изучение специальной литературы, но и обращение к дополнительным источникам – справочникам, энциклопедиям, словарям. Эти источники – важное подспорье в самостоятельной работе студента, поскольку глубокое изучение именно их материалов позволит студенту уверенно «распознавать», а затем самостоятельно оперировать теоретическими категориями и понятиями, следовательно – освоить новейшую научную терминологию. Такого рода работа с литературой обеспечивает решение студентом поставленной перед ним задачи (подготовка к практическому занятию, выполнение контрольной работы и т.д.).

Выбор литературы для изучения делается обычно по предварительному списку литературы, который выдал преподаватель, либо путем самостоятельного отбора материалов. После этого непосредственно начинается изучение материала, изложенного в книге.

Прежде чем приступить к чтению, необходимо запомнить или записать выходные данные издания: автор, название, издательство, год издания, название интересующих глав. Предисловие или введение книги поможет установить, на кого рассчитана данная публикация, какие задачи ставил перед собой автор. Это помогает составить представление о степени достоверности или научности данной книги. Содержание (оглавление) дает представление о системе изложения ключевых положений всей публикации и помогает найти нужные сведения. Если в книге есть главы или отдельные параграфы, которые соответствуют исследуемой теме дисциплины, то после этого необходимо ознакомиться с введением.

Во введении или предисловии разъясняются цели издания, его значение, содержится краткая информация о содержании глав работы. Иногда полезно после этого посмотреть послесловие или заключение. Особенно это важно, если это не учебник, а монография, потому что в заключении объясняется то, что может оказаться непонятным при изучении материала. В целом, это поможет правильно структурировать полученные знания.

После просмотра книги целиком или отдельной главы, которая была необходима для изучения определенной темы курса, нужно сделать записи в виде краткого резюме источника. В таком резюме следует отразить основную мысль изученного материала, приведенные в ее подтверждение автором аргументы, ценность данных аргументов и т.п. Данные аргументы помогут сформировать собственную оценку изучаемого вопроса.

Во время изучения литературы необходимо конспектировать и составлять рабочие записи прочитанного. Такие записи удлиняют процесс проработки, изучения книги, но способствуют ее лучшему осмыслению и усвоению, выработке навыков

кратко и точно излагать материал. В идеале каждая подобная запись должна быть сделана в виде самостоятельных ответов на вопросы, которые задаются в конце параграфов и глав изучаемой книги. Однако такие записи могут быть сделаны и в виде простого и развернутого плана, цитирования, тезисов, резюме, аннотации, конспекта.

При изучении литературы особое внимание следует обращать на новые термины и понятия. Понимание сущности и значения терминов способствует формированию способности логического мышления, приучает мыслить абстракциями, что важно при усвоении дисциплины. Поэтому при изучении темы курса студенту следует активно использовать универсальные и специализированные энциклопедии, словари, иную справочную литературу.

Вся рекомендуемая для изучения курса литература подразделяется на основную и дополнительную. К основной литературе относятся источники, необходимые для полного и твердого усвоения учебного материала (учебники и учебные пособия). Необходимость изучения дополнительной литературы диктуется прежде всего тем, что в учебной литературе (учебниках) зачастую остаются неосвещенными современные проблемы, а также не находят отражение новые документы, события, явления, научные открытия последних лет. Поэтому дополнительная литература рекомендуется для более углубленного изучения программного материала.

Список литературы

1. Дудник Е.А. Компьютерное моделирование структурно-энергетических превращений в двумерном кристалле [Электр. ресурс]: Монография /Е.А. Дудник, М.Д. Старостенков, 2005.-233с.(26 экз.)

2. Зубкова, Т. М. Технология разработки программного обеспечения : учебное пособие / Т. М. Зубкова. — Оренбург : Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2017. — 469 с. — ISBN 978-5-7410-1785-2. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <http://www.iprbookshop.ru/78846.html> (дата обращения: 05.02.2021). — Режим доступа: для авторизир. пользователей

3. Старовиков, М. И. Введение в экспериментальную физику : учебное пособие / М. И. Старовиков. — Санкт-Петербург : Лань, 2008. — 240 с. — ISBN 978-5-8114-0862-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/reader/book/379/#233> (дата обращения: 28.01.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

4. Сарина, М.П. Физика твердого тела : учебное пособие : [16+] / М.П. Сарина ; Новосибирский государственный технический университет. — Новосибирск : Новосибирский государственный технический университет, 2017. — 107 с. : ил., табл., граф. — Режим доступа: по подписке. — URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=576504> (дата обращения: 25.03.2021). — Библиогр. в кн. — ISBN 978-5-7782-3319-5. — Текст : электронный.

5. Разумовская, И.В. Физика твердого тела : учебное пособие / И.В.

Разумовская. – Москва : Прометей, 2011. – Ч. 2. Динамика кристаллической решетки. Тепловые свойства решетки. – 64 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=108460> (дата обращения: 25.03.2021). – ISBN 978-5-4263-0032-3. – Текст : электронный.

6. Фомин, Д.В. Экспериментальные методы физики твердого тела : учебное пособие : [16+] / Д.В. Фомин. – Изд. 2-е, стер. – Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2019. – 187 с. : ил., схем., табл. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=575229> (дата обращения: 25.03.2021). – Библиогр. в кн. – ISBN 978-5-4499-0151-4. – DOI 10.23681/575229. – Текст : электронный.

7. Корабельников, Д.В. Физика наноструктур : учебное пособие : [16+] / Д.В. Корабельников, Н.Г. Кравченко, А.С. Поплавной ; Кемеровский государственный университет. – Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2016. – 161 с. : схем., ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=481557> (дата обращения: 25.03.2021). – ISBN 978-5-8353-2048-6. – Текст : электронный.

8. <http://www.mks-phys.ru>

9. <https://nsportal.ru/vu/shkola/fizika/primenenie-kompyuternykh-tekhnologii-na-urok-akh-fiziki/lektsiya-%E2%84%963-modelirovanie-fi> - Виртуальный университет образовательной социальной сети

10. Стивенс, Р. Delphi. Готовые алгоритмы : учебное пособие / Р. Стивенс. — Москва : ДМК Пресс, 2007. — 384 с. — ISBN 5-94074-106-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/1234> (дата обращения: 05.02.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.