

**Белорусский государственный университет**

**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор по учебной работе  
Белорусского государственного университета



А.Л. Толстик

(подпись)

08.05.2017

(дата утверждения)

Регистрационный № УД- 4025 /уч.

## **ЛАБОРАТОРИЯ СПЕЦИАЛИЗАЦИИ**

### **МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ ЯДЕРНОЙ ТЕХНИКИ**

**Учебная программа учреждения высшего образования  
по учебной дисциплине для специальности  
1-31 04 . 06 Ядерные физика и технологии**

Минск 2017

Учебная программа составлена на основе ОСВJ 1-31 04 06-2013 и учебного плана № G31-142/уч. от 30.05.2013 г.

**СОСТАВИТЕЛИ:**

**В.В. Углов** — заведующий кафедрой физики твердого тела Белорусского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор;

**Н.Н. Дорожкин** — доцент кафедры физики твердого тела Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент;

**РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:**

Кафедрой физики твердого тела физического факультета Белорусского государственного университета  
(протокол № 10 от 16 мая 2017 г.);

Советом физического факультета Белорусского государственного университета  
(протокол № 11 от 8 июня 2017);

## ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Программа лаборатории специализации "Моделирование структуры и физических свойств материалов ядерной техники" разработана для специальности 1-31 04 06 ядерные физика и технологии.

**Цель учебной дисциплины** — практическое овладение студентами основ компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния и радиационной физике твердого тела.

**Основные задачи учебной дисциплины** — дать представление о роли компьютеров в современной физике, основных методах компьютерного моделирования и областях их применения, продемонстрировать особенности применения основных методов компьютерного моделирования в радиационной физике твердого тела, научить студентов применять компьютерное моделирование в их научно-исследовательской работе.

Метод компьютерного моделирования является как инструментом для научных исследований, так и методом образования. Этот метод способствует развитию исследовательского обучения, приближению процесса обучения к научному поиску, что является принципиально важным с точки зрения педагогики. Такой подход позволит ускорить достижение заданного уровня знаний и создать необходимую мотивацию для познавательной деятельности.

Численное моделирование составляет неотъемлемую часть современной фундаментальной и прикладной науки, причем по важности оно приближается к традиционным экспериментальным и теоретическим методам. Поэтому будущие научные работники, инженеры и преподаватели обязательно должны владеть технологией компьютерного моделирования, уметь исследовать различные физические явления и процессы с помощью компьютера.

Суть метода компьютерного моделирования заключается в том, что создается математическая модель процесса. Благодаря замене реального объекта соответствующей ему моделью, появляется возможность сформулировать задачу его изучения как математическую и воспользоваться для анализа универсальным математическим аппаратом, который не зависит от конкретной природы объекта.

В лабораторном практикуме рассматривается применение компьютерного моделирования в радиационной физике твердого тела. Основное внимание уделено атомистическому моделированию свойств материалов ядерной техники, моделированию пробега ионов в твердых телах (метод Монте-Карло) и моделированию радиационных эффектов при облучении нейтронами.

Лабораторный практикум рассчитан на студентов 5-го курса и базируется на спецкурсах «Структурно-фазовые изменения при облучении» и «Компьютерное моделирование физических процессов в кристаллах».

В результате выполнения лабораторного практикума «Моделирование структуры и физических свойств материалов ядерной техники» студенты должны:

- **знать** основные методы компьютерного моделирования физических систем;
- **знать** особенности моделирования радиационных эффектов в кристаллах;

- **уметь** анализировать компьютерные модели физических процессов;
  - **владеть** навыками работы с программами общего и специального назначения для моделирования свойств материалов и радиационных эффектов.
- В результате изучения дисциплины студент должен обладать следующими компетенциями.
- **Академические компетенции:**
  - АК-1. Уметь применять базовые научно-технические знания для решения теоретических и практических задач.
  - АК-2. Владеть системным и сравнительным анализом.
  - АК-3. Владеть исследовательскими навыками.
  - АК-4. Уметь работать самостоятельно.
  - АК-7. Иметь навыки, связанные с использованием технических устройств, управлением информацией и работой компьютером.
  - АК-8. Иметь лингвистические навыки (устная и письменная коммуникация).
  - **Социально-личностные компетенции:**
  - СЛК-1. Обладать качествами гражданственности.
  - СЛК-2. Быть способным к социальному взаимодействию.
  - СЛК-3. Обладать способностью к межличностным коммуникациям.
  - СЛК-4. Владеть навыками здорового образа жизни.
  - **Профессиональные компетенции:**
  - ПК-1. Применять знания теоретических и экспериментальных основ ядерной физики и ядерных технологий, методов измерения величин, организации и ведения научно-производственной, научно-педагогической работы в области ядерно-физических технологий и атомной энергетики.
  - ПК-2. Пользоваться компьютерными методами сбора, хранения и обработки информации.
  - ПК-5. Применять полученные знания фундаментальных положений физики, экспериментальных, теоретических и компьютерных методов исследования, планирования, организации и ведения научно-технической работы.
  - ПК-9. Пользоваться глобальными информационными ресурсами.
  - ПК-10. Пользоваться государственными языками Республики Беларусь и иными иностранными языками как средством делового общения.
  - ПК-12. Осуществлять поиск, систематизацию и анализ информации по перспективным направлениям развития отрасли, инновационным технологиями, проектам и решениям.

Программа курса составлена в соответствии с требованиями образовательного стандарта. Общее количество часов – 90; аудиторное количество часов – 52. Аудиторные занятия проводятся в виде лабораторных занятий.

Занятия проводятся на 5-м курсе в 10-м семестре. Форма текущей аттестации по учебной дисциплине — зачет.

## СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

### **1. Моделирование облучения материалов ядерной техники нейтронами**

Механизмы радиационного повреждения твердых тел при нейтронном облучении. Групповой подход. Макроскопическое сечение взаимодействия. Упругое рассеяние нейтронов. Неупругое рассеяние нейтронов. Моделирование пробегов нейтронов в веществе.

### **2. Атомистическое моделирование теплофизических свойств материалов ядерной техники**

Метод молекулярной динамики для моделирование теплофизических свойств материалов. Моделирование теплового расширения, теплоемкости и калорической кривой.

### **3. Моделирование фазовых переходов в материалах ядерной техники**

Метод молекулярной динамики для моделирование фазовых превращений. Моделирование плавления и кристаллизации материалов ядерной техники.

### **4. Моделирование механических и упругих свойств материалов ядерной техники**

Методы моделирования. Уравнение состояния. Прочность на разрыв при всестороннем растяжении. Упругие модули.

### **5. Моделирование пространственных распределений методом Монте-Карло с помощью программы SRIM/TRIM (легкие ионы)**

Модель бинарных соударений и метод Монте-Карло для моделирования пробегов ионов. Потенциалы межатомного взаимодействия, используемые в модели бинарных соударений.

### **6. Моделирование пространственных распределений методом Монте-Карло с помощью программы SRIM/TRIM (тяжелые ионы)**

Модель бинарных соударений и метод Монте-Карло для моделирования пробегов ионов. Потенциалы межатомного взаимодействия, используемые в модели бинарных соударений.

### **7. Атомистическое моделирование конфигураций радиационных дефектов в материалах ядерной техники**

Методы моделирование конфигураций дефектов. Основные конфигурации дефектов: вакансии, пары Френкеля, собственные межузельные атомы, примесные атомы.

### **8. Атомистическое моделирование диффузионных характеристик материалов ядерной техники**

Метод молекулярной динамики для моделирования диффузионных характеристик материалов. Формула Аррениуса. Средне квадратичные смещения атомов. Формулы Эйнштейна и Кубо-Гринвуда. Механизмы диффузии. Энергия активации диффузии. Моделирование диффузионных траекторий.



## ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

### Рекомендуемая литература

1. **Панин, М.П.** Моделирование переноса излучения: Учебное пособие. / М. П. Панин М.: МИФИ, 2008. – 212 с.
2. **Франк-Каменецкий, Л. Д.** Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло / Л. Д. Франк-Каменецкий. М. Атомиздат, 1978. – 96 с.
3. **Дорожкин, Н. Н.** Компьютерное моделирование в физике твердого тела: лаб. практикум для студентов физ. фак. / Н. Н. Дорожкин, Н. Г. Якутович. Минск: БГУ, 2010. 107 с. ISBN 978-985-518-330-4.
4. **Пранявичюс, Л.** Модификация свойств твердых тел ионными пучками. / Л. Пранявичюс, Ю. Дудонис. Вильнюс, 1980 г. -242 с.
5. **Кумахов, М.А.** Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. / М.А. Кумахов, Ф.Ф.Комаров. Минск, Из-во. БГУ.
6. **Аккерман, А.Ф.** Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. / А.Ф. Аккерман. М. Энергоатомиздат, 1991.
7. **Ziegler, J. F.** The Stopping and Range of Ions in Solids / J. F. Ziegler, J. P. Biersack U. Littmark. New York, 1985.
8. **Кирсанов, В.В.** ЭВМ-эксперимент в атомном материаловедении. / В.В. Кирсанов. – М., 1990. – с. 303.

### Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности

1. Отчеты по лабораторным работам;
2. Устный опрос.

### Рекомендации по контролю качества усвоения знаний и проведению аттестации

Текущий контроль качества усвоения знаний по дисциплине осуществляется путем приема отчетов по выполненным лабораторным работам, а также в виде устных опросов по разделам дисциплины. Контрольные мероприятия проводятся в соответствии с учебно-методической картой дисциплины. В случае неявки на контрольное мероприятие по уважительной причине студент вправе по согласованию с преподавателем выполнить его в дополнительное время. Для студентов, получивших неудовлетворительные оценки за контрольные мероприятия, либо не явившихся по неуважительной причине, по согласованию с преподавателем и с разрешения заведующего кафедрой мероприятие может быть проведено повторно.

Текущая аттестация по учебной дисциплине проводится в форме протокола выполнения лабораторных работ и устных отчетов по лабораторным работам.

Итоговой оценкой по учебной дисциплине является «зачтено».

## ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Конструкционные материалы ядерных реакторов	Кафедра физики твердого тела	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте протокол № <u>  10  </u> от <u>  16  </u> . <u>  05  </u> .2017 <u>  </u>
Компьютерное моделирование физических процессов в кристаллах	Кафедра физики твердого тела	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте протокол № <u>  10  </u> от <u>  16  </u> . <u>  05  </u> .2017 <u>  </u>
Структурно-фазовые изменения при облучении	Кафедра физики твердого тела	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте протокол № <u>  10  </u> от <u>  16  </u> . <u>  05  </u> .2017 <u>  </u>



