

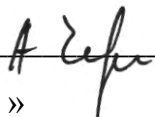
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»  
**Саровский физико-технический институт -**  
филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения  
высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»  
(СарФТИ НИЯУ МИФИ)

**ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ**

**Кафедра «Теоретической и экспериментальной механики»**

**УТВЕРЖДАЮ**

**Декан ФТФ, член корр. РАН, д.ф-м.н.**

 **А.К. Чернышев**

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Молекулярная динамика**

наименование дисциплины

Направление подготовки (специальность)	<u>15.04.03 Прикладная механика</u>
Наименование образовательной программы	<u>Динамика и прочность машин, приборов и аппаратуры</u>
Квалификация (степень) выпускника	<u>магистр</u>
Форма обучения	<u>очная</u>

Программа одобрена на заседании кафедры

Зав. кафедрой ТиЭМ, доцент, д.т.н.

А.Л. Михайлов

протокол № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ 2022 г.

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 г.

г. Саров, 2022 г.

Программа переутверждена на 202\_\_\_/202\_\_\_ учебный год с изменениями в соответствии с семестровыми учебными планами академических групп ФТФ, ФИТЭ на 202\_\_\_/202\_\_\_ учебный год.

Заведующий кафедрой ТиЭМ, доцент, д.т.н.

А.Л. Михайлов

Программа переутверждена на 202\_\_\_/202\_\_\_ учебный год с изменениями в соответствии с семестровыми учебными планами академических групп ФТФ, ФИТЭ на 202\_\_\_/202\_\_\_ учебный год.

Заведующий кафедрой ТиЭМ, доцент, д.т.н.

А.Л. Михайлов

Программа переутверждена на 202\_\_\_/202\_\_\_ учебный год с изменениями в соответствии с семестровыми учебными планами академических групп ФТФ, ФИТЭ на 202\_\_\_/202\_\_\_ учебный год.

Заведующий кафедрой ТиЭМ, доцент, д.т.н.

А.Л. Михайлов

Программа переутверждена на 202\_\_\_/202\_\_\_ учебный год с изменениями в соответствии с семестровыми учебными планами академических групп ФТФ, ФИТЭ на 202\_\_\_/202\_\_\_ учебный год.

Заведующий кафедрой ТиЭМ, доцент, д.т.н.

А.Л. Михайлов

<b>Семестр</b>	<b>В форме практической подготовки</b>	<b>Трудоемкость, кред.</b>	<b>Общий объем курса, час.</b>	<b>Лекции, час.</b>	<b>Практич. занятия, час.</b>	<b>Лаборат. работы, час.</b>	<b>СРС, час.</b>	<b>КР/КП</b>	<b>Форма(ы) контроля, экз./зач./ЗсО/</b>	<b>Интерактивные часы</b>
<b>2</b>	16	4	144	16	16	-	76	-	Э	6
<b>ИТОГО</b>	<b>16</b>	<b>4</b>	<b>144</b>	<b>16</b>	<b>16</b>	<b>-</b>	<b>76</b>	<b>-</b>	<b>36</b>	<b>6</b>

## **АННОТАЦИЯ**

Дисциплина «Молекулярная динамика» обеспечивает не только нормативно-методическую базу освоения обучающимися профессиональных компетенций в соответствии с требованиями ОС ВО по направлению подготовки 15.04.03 «Прикладная механика», с квалификацией выпускника магистр, но и высокую профессиональную конкурентоспособность выпускников и их востребованность для решения актуальных задач у потребностей регионального и Всероссийского рынка труда, с учетом перспектив его развития.

### **1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Целью освоения дисциплины «Молекулярная динамика» является ознакомление слушателей с теоретическими основами метода молекулярной динамики и с современными компьютерными технологиями, которые применяются для моделирования свойств материалов методами молекулярной динамики.

### **2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО**

Дисциплина «Молекулярная динамика» относится к базовой части образовательной программы подготовки магистров по профилю «Динамика и прочность машин, приборов и аппаратуры» направления 15.04.03 «Прикладная механика».

Дисциплина основывается на знаниях, полученных в предшествующих дисциплинах «Физика», «Высшая математика», «Сопrotивление материалов», «Вычислительная механика».

Освоение дисциплины необходимо при выполнении выпускной квалификационной работы магистра.

### **3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ**

Ожидается, что в результате освоения дисциплины студент приобретет следующие компетенции:

## Профессиональные компетенции (ПК)

в соответствии с задачами и объектами (областями знаний) профессиональной деятельности:

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	Объект или область знания	Код и наименование профессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
Тип задачи профессиональной деятельности: <b>научно-исследовательский, включающий расчетно-экспериментальную деятельность</b>			
подготовка и проведение расчетно-экспериментальных исследований в области прикладной механики	физико-механические процессы и явления, машины, конструкции, приборы и аппаратура и другие объекты современной техники различных подразделений РФЯЦ-ВНИИЭФ, которые для своего изучения и решения требуют разработки и применения экспериментальных методов исследования, математических и компьютерных моделей, основанных на законах механики.	<b>ПК-1.1</b> способен к проведению научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ по тематике организаций ядерно-оружейного комплекса  <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт «40.011. Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам»	З-ПК-1.1 знать методы проведения исследований и разработок У-ПК-1.1 уметь оформлять результаты научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (патенты, научно-техническая документация) В-ПК-1.1 владеть навыками проведения анализа и теоретического обобщения научных данных в соответствии с задачами исследования

#### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ\*

№ п/п	Наименование раздела /темы дисциплины	№ недели	Виды учебной работы						
			Лекции	Практ. занятия/ семинары	Лаб. работы	СРС	Текущий контроль (форма)*	Максимальный балл (см. п. 5.3)	
			16	16	-	76			
<b>Семестр 2</b>									
<b>Раздел 1.</b>									
1.1.	Тема 1. Методы моделирования свойств материалов на микроскопическом уровне	1-3	2	2		10	УО	5	
1.2	Тема 2. Атом-атомные и межмолекулярные взаимодействия	4-6	2	2		10	УО	5	
1.3	Тема 3. Метод моделирования молекулярной динамики	7-8	4	4		20	УО	5	
<b>Рубежный контроль</b>		<b>8</b>						<b>Кр</b>	<b>10</b>
<b>Раздел 2.</b>									
2.1	Тема 1. Пакеты программ МД моделирования	9-13	4	4		16	УО	5	
2.2	Тема 2. Обработка результатов МД моделирования	14-16	4	4		20	УО	10	
<b>Рубежный контроль</b>		<b>16</b>						<b>Кр</b>	<b>10</b>
<b>Промежуточная аттестация</b>						<b>Экзамен</b>	<b>36</b>	<b>45</b>	
<b>Посещаемость</b>								<b>5</b>	
<b>Итого:</b>			<b>16</b>	<b>16</b>	<b>-</b>	<b>76</b>	<b>36</b>	<b>100</b>	

\*Сокращение наименований форм текущего, рубежного и промежуточного контроля:

УО – устный опрос

Кр – контрольная работа

## Лекционный курс

№	Наименование раздела /темы дисциплины	Содержание
<b>2 семестр</b>		
<b>Раздел 1.</b>		
1.1	Тема 1. Методы моделирования свойств материалов на микроскопическом уровне	Цели и задачи моделирования. Исторический обзор методов моделирования. Молекулярная механика, метод Монте-Карло, молекулярная динамика (МД), квантовая химия, квантовая молекулярная динамика. Достоинства и ограничения этих методов
1.2	Тема 2. Атом-атомные и межмолекулярные взаимодействия	Понятие о межатомных потенциалах взаимодействия. Парные потенциалы атом-атомных взаимодействий. Непарные, многочастичные межатомные потенциалы. Понятие о типах химических связей. Ионный, ковалентный, металлический тип химических связей. Электростатические, невалентные, внутримолекулярные взаимодействия. Параметризация межатомных и межмолекулярных взаимодействий.
1.3	Тема 3. Метод моделирования молекулярной динамики	Алгоритм моделирования. Этапы моделирования. Модельные системы, их размер и граничные условия. Термодинамические ансамбли, принципы термостабилизации систем и поддержания постоянного давления. Обмен данными с программами обработки.
<b>Раздел 2.</b>		
2.1	Тема 1. Пакеты программ МД моделирования	Свободно распространяемые и коммерческие пакеты программ моделирования. Принципы управления вычислительным процессом. Контроль параметров моделирования и состояния системы.
2.2	Тема 2. Обработка результатов МД моделирования	Вычисление коэффициентов диффузии. Функции радиального распределения и более сложные функции парного распределения. Определение методом МД моделирования изотерм сжатия и ударных адиабат материалов. Моделирование температурных зависимостей физических величин. Визуализация структуры сложных молекул.

## Практические/семинарские занятия

№	Наименование раздела /темы дисциплины	Содержание
<b>2 семестр</b>		
<b>Раздел 1.</b>		
1.1	Тема 1. Методы моделирования свойств материалов на микроскопическом уровне	Цели и задачи моделирования. Исторический обзор методов моделирования. Молекулярная механика, метод Монте-Карло, молекулярная динамика (МД), квантовая химия, квантовая молекулярная

		динамика. Достоинства и ограничения этих методов
1.2	Тема 2. Атом-атомные и межмолекулярные взаимодействия	Понятие о межатомных потенциалах взаимодействия. Парные потенциалы атом-атомных взаимодействий. Непарные, многочастичные межатомные потенциалы. Понятие о типах химических связей. Ионный, ковалентный, металлический тип химических связей. Электростатические, невалентные, внутримолекулярные взаимодействия. Параметризация межатомных и межмолекулярных взаимодействий.
1.3	Тема 3. Метод моделирования молекулярной динамики	Алгоритм моделирования. Этапы моделирования. Модельные системы, их размер и граничные условия. Термодинамические ансамбли, принципы термостабилизации систем и поддержания постоянного давления. Обмен данными с программами обработки.
<b>Раздел 2.</b>		
2.1	Тема 1. Пакеты программ МД моделирования	Свободно распространяемые и коммерческие пакеты программ моделирования. Принципы управления вычислительным процессом. Контроль параметров моделирования и состояния системы.
2.2	Тема 2. Обработка результатов МД моделирования	Вычисление коэффициентов диффузии. Функции радиального распределения и более сложные функции парного распределения. Определение методом МД моделирования изотерм сжатия и ударных адиабат материалов. Моделирование температурных зависимостей физических величин. Визуализация структуры сложных молекул.

#### 4.3. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы студентов

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учебное пособие в 10 т. Т.V. Статистическая физика. М.: Наука. 1987.

Самостоятельная работа направлена на закрепление и углубление полученных теоретических и практических знаний. Включает в себя:

- ✓ работу с предыдущим лекционным материалом;
- ✓ самостоятельное изучение отдельных тем дисциплины;
- ✓ поиск и обзор литературы и электронных источников;
- ✓ чтение и изучение учебника и учебных пособий.



## 5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Фонд оценочных средств по дисциплине обеспечивает проверку освоения планируемых результатов обучения (компетенций и их индикаторов) посредством мероприятий текущего, рубежного и промежуточного контроля по дисциплине.

### 5.1. Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине

Связь между формируемыми компетенциями и формами контроля их освоения представлена в следующей таблице:

Раздел	Темы занятий	Компетенция	Индикаторы освоения	Текущий контроль, неделя
<b>Семестр 2</b>				
Раздел 1	Тема 1. Методы моделирования свойств материалов на микрокопическом уровне	ПК-1.1	3-ПК-1.1; У-ПК-1.1; В-ПК-1.1	УО 1-3
	Тема 2. Атом-атомные и межмолекулярные взаимодействия		3-ПК-1.1; У-ПК-1.1; В-ПК-1.1	УО 4-6
	Тема 3. Метод моделирования молекулярной динамики		3-ПК-1.1; У-ПК-1.1; В-ПК-1.1	УО 7-8
<b>Рубежный контроль</b>		ПК-1.1	3-ПК-1.1; У-ПК-1.1; В-ПК-1.1	Кр 8
Раздел 2	Тема 1. Пакеты программ МД моделирования	ПК-1.1	3-ПК-1.1; У-ПК-1.1; В-ПК-1.1	УО 9-13
	Тема 2. Обработка результатов МД моделирования		3-ПК-1.1; У-ПК-1.1; В-ПК-1.1	УО 14-16
<b>Рубежный контроль</b>		ПК-1.1	3-ПК-1.1; У-ПК-1.1; В-ПК-1.1	Кр 16
<b>Промежуточная аттестация</b>		ПК-1.1	3-ПК-1.1; У-ПК-1.1; В-ПК-1.1	<b>Экзамен</b>

**5.2. Примерные контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы**

#### 5.2.1. Оценочные средства для текущего контроля

##### 5.2.1.1. Примерные вопросы для устного опроса (УО)

1. Кинетическая теория идеального газа. Давление, внутренняя энергия, температура. Характерные размеры атомов и молекул, длина свободного пробега, частота столкновений.
2. Закон распределения Максвелла-Больцмана по скоростям молекул. Средняя скорость молекул. Понятие о степенях свободы атомов и молекул
3. Понятие о межатомных и межмолекулярных силах. Уравнения состояния реального газа и твёрдого тела.
4. Потенциальные функции межатомного и межмолекулярного взаимодействия. Понятие о парных и непарных потенциалах межатомного взаимодействия.
5. Характерные парные потенциалы межатомного взаимодействия. Потенциал Леннарда-Джонса. Потенциал Морзе. Параметры потенциалов и их физические смысл.
6. Понятие о кристаллическом состоянии твёрдого тела. Строение кристаллов и тепловое движение атомов в кристаллической решетке.
7. Понятие о металлическом состоянии вещества. Свободные электроны в металлах. Природа химической связи в металлах. Скорость звука и ударные волны в металлах.
8. Базовые понятия метода молекулярной динамики. Уравнения движения для атомов и молекул, условия применения классического приближения. Единицы измерения и обезразмеривание уравнений движения при МД моделировании.
9. Понятие о расчетной ячейке при МД моделировании. Периодические граничные условия.
10. Численные методы решения уравнений движения молекулярной динамики. Метод Верлета. Метод Leapfrog.
11. Методы оптимизации численного решения уравнений движения при МД моделировании. Обрезание межатомного потенциала. Список ближайших соседей.
12. МД моделирование для ансамблей частиц с постоянной температурой и постоянным давлением.
13. Вычисление средних значений параметров состояния по результатам МД моделирования. Процедура усреднения параметров по траекториям движения атомов или молекул.
14. Критерии выбора численных схем интегрирования уравнений движения при МД моделировании. Критерии выбора шага интегрирования.
15. Проблема межатомных потенциалов. Природа межатомных и межмолекулярных сил. Приближение Борна-Опенгеймера для описания межатомных взаимодействий.
16. Проблема межатомных потенциалов. Понятие о двухчастичных и многочастичных межатомных потенциалах. Методы определения параметров межатомных потенциалов.
17. Многочастичные потенциалы для описания свойств металлов. Модель погружённого атома. Определение параметров для модели погруженного атома.

18. Многочастичные потенциалы для описания ковалентных химических связей. Потенциал Терзофа и Стиллинжера-Вебера.
19. Ограничения МД моделирования, основанного на модели межатомных потенциалов. Понятие об МД моделировании на основе расчета межатомного силового поля из первых принципов.
20. Компьютерные коды для проведения МД моделирования. Понятие о параллельных вычислениях.

## **5.2.2 Оценочные средства для рубежного контроля**

### **5.2.2.1 Примерные вопросы для контрольной работы (Кр)**

1. Кинетическая теория идеального газа. Давление, внутренняя энергия, температура. Характерные размеры атомов и молекул, длина свободного пробега, частота столкновений.
2. Закон распределения Максвелла-Больцмана по скоростям молекул. Средняя скорость молекул. Понятие о степенях свободы атомов и молекул
3. Понятие о межатомных и межмолекулярных силах. Уравнения состояния реального газа и твёрдого тела.
4. Потенциальные функции межатомного и межмолекулярного взаимодействия. Понятие о парных и непарных потенциалах межатомного взаимодействия.
5. Характерные парные потенциалы межатомного взаимодействия. Потенциал Леннарда-Джонса. Потенциал Морзе. Параметры потенциалов и их физические смысл.
6. Понятие о кристаллическом состоянии твёрдого тела. Строение кристаллов и тепловое движение атомов в кристаллической решетке.
7. Понятие о металлическом состоянии вещества. Свободные электроны в металлах. Природа химической связи в металлах. Скорость звука и ударные волны в металлах.
8. Базовые понятия метода молекулярной динамики. Уравнения движения для атомов и молекул, условия применения классического приближения. Единицы измерения и обезразмеривание уравнений движения при МД моделировании.
9. Понятие о расчетной ячейке при МД моделировании. Периодические граничные условия.
10. Численные методы решения уравнений движения молекулярной динамики. Метод Верлета. Метод Leapfrog.
11. Методы оптимизации численного решения уравнений движения при МД моделировании. Обрезание межатомного потенциала. Список ближайших соседей.
12. МД моделирование для ансамблей частиц с постоянной температурой и постоянным давлением.

13. Вычисление средних значений параметров состояния по результатам МД моделирования. Процедура усреднения параметров по траекториям движения атомов или молекул.
14. Критерии выбора численных схем интегрирования уравнений движения при МД моделировании. Критерии выбора шага интегрирования.
15. Проблема межатомных потенциалов. Природа межатомных и межмолекулярных сил. Приближение Борна-Опенгеймера для описания межатомных взаимодействий.
16. Проблема межатомных потенциалов. Понятие о двухчастичных и многочастичных межатомных потенциалах. Методы определения параметров межатомных потенциалов.
17. Многочастичные потенциалы для описания свойств металлов. Модель погружённого атома. Определение параметров для модели погруженного атома.
18. Многочастичные потенциалы для описания ковалентных химических связей. Потенциал Терзофа и Стиллинжера-Вебера.
19. Ограничения МД моделирования, основанного на модели межатомных потенциалов. Понятие об МД моделировании на основе расчета межатомного силового поля из первых принципов.
20. Компьютерные коды для проведения МД моделирования. Понятие о параллельных вычислениях.

### **5.2.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации**

#### **5.2.3.1 Примерные вопросы к экзамену**

1. Кинетическая теория идеального газа. Давление, внутренняя энергия, температура. Характерные размеры атомов и молекул, длина свободного пробега, частота столкновений.
2. Закон распределения Максвелла-Больцмана по скоростям молекул. Средняя скорость молекул. Понятие о степенях свободы атомов и молекул
3. Понятие о межатомных и межмолекулярных силах. Уравнения состояния реального газа и твёрдого тела.
4. Потенциальные функции межатомного и межмолекулярного взаимодействия. Понятие о парных и непарных потенциалах межатомного взаимодействия.
5. Характерные парные потенциалы межатомного взаимодействия. Потенциал Леннарда-Джонса. Потенциал Морзе. Параметры потенциалов и их физические смысл.
6. Понятие о кристаллическом состоянии твёрдого тела. Строение кристаллов и тепловое движение атомов в кристаллической решетке.
7. Понятие о металлическом состоянии вещества. Свободные электроны в металлах. Природа химической связи в металлах. Скорость звука и ударные волны в металлах.

8. Базовые понятия метода молекулярной динамики. Уравнения движения для атомов и молекул, условия применения классического приближения. Единицы измерения и обезразмеривание уравнений движения при МД моделировании.
9. Понятие о расчетной ячейке при МД моделировании. Периодические граничные условия.
10. Численные методы решения уравнений движения молекулярной динамики. Метод Верлета. Метод Leapfrog.
11. Методы оптимизации численного решения уравнений движения при МД моделировании. Обрезание межатомного потенциала. Список ближайших соседей.
12. МД моделирование для ансамблей частиц с постоянной температурой и постоянным давлением.
13. Вычисление средних значений параметров состояния по результатам МД моделирования. Процедура усреднения параметров по траекториям движения атомов или молекул.
14. Критерии выбора численных схем интегрирования уравнений движения при МД моделировании. Критерии выбора шага интегрирования.
15. Проблема межатомных потенциалов. Природа межатомных и межмолекулярных сил. Приближение Борна-Опенгеймера для описания межатомных взаимодействий.
16. Проблема межатомных потенциалов. Понятие о двухчастичных и многочастичных межатомных потенциалах. Методы определения параметров межатомных потенциалов.
17. Многочастичные потенциалы для описания свойств металлов. Модель погружённого атома. Определение параметров для модели погруженного атома.
18. Многочастичные потенциалы для описания ковалентных химических связей. Потенциал Терзофа и Стиллинжера-Вебера.
19. Ограничения МД моделирования, основанного на модели межатомных потенциалов. Понятие об МД моделировании на основе расчета межатомного силового поля из первых принципов.
20. Компьютерные коды для проведения МД моделирования. Понятие о параллельных вычислениях.

### **5.3. Шкалы оценки образовательных достижений**

Рейтинговая оценка знаний является интегральным показателем качества теоретических и практических знаний и навыков студентов по дисциплине и складывается из оценок, полученных в ходе текущего контроля и промежуточной аттестации.

Результаты текущего контроля и промежуточной аттестации подводятся по шкале балльно-рейтинговой системы.

Шкала каждого контрольного мероприятия лежит в пределах от 0 до установленного максимального балла включительно. Итоговая аттестация по дисциплине оценивается по 100-балльной шкале и представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках текущего и промежуточного контроля.

Итоговая оценка выставляется в соответствии со следующей шкалой:

Сумма баллов	Оценка по 4-ех балльной шкале	Оценка ECTS	Требования к уровню освоению учебной дисциплины
90-100	5 – <i>«отлично»</i>	A	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
85-89	4 – <i>«хорошо»</i>	B	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
75-84		C	
70-74		D	
65-69	3 – <i>«удовлетворительно»</i>	E	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
60-64			
Ниже 60	2 – <i>«неудовлетворительно»</i>	F	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

## **6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА**

1. А. В. Комолкин, М. Г. Шеляпина. Метод молекулярной динамики. СПб: «Соло», 2007.
2. Метод молекулярной динамики в физической химии. / Отв. ред. Ю. Л. Товбин. М.: Наука, 1996.
3. И.Г. Каплан. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий; Наука: Москва, 1982.
4. Я.Б.Зельдович, Ю.П.Райзер. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматлит, 2008.

### **ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА**

1. В.А. Гольдаде, Л.С.Пинчук. Физика конденсированного состояния. Минск, «Беларуская навука», 2009.
2. J.M. Haile. Molecular Dynamics Simulation. Elementary Methods, A Wiley-Interscience Publication 1992.
3. Dean Frenkel, Berend Smit. Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications. Academic Press, 2002.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учебное пособие в 10 т. Т.V. Статистическая физика. М.: Наука. 1987.
5. Физика взрыва. Под редакцией Л.П. Орленко. М.: Физматлит. 2004. 832 с.
6. Selezenev A.A., Aleynikov A.Yu., Gantchuk N.S., Yermakov P.V., Labanovski J.K., Korkin A.A. SageMD: molecular-dynamic software package to study properties of materials with different models for interatomic interactions, Computational Material Science, v.28, pp.107-124 (2003).

### **ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:**

1. Операционные системы Windows.
2. Стандартные офисные программы;
3. Учебные версии программных комплексов LAMMPS, SAGE MD, MSC. Software, MATLAB, MATHCAD

### **LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:**

1. Интернет-ресурсы по тематике дисциплины.

## **7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Для обеспечения освоения дисциплины «Молекулярная динамика» необходимо наличие учебных аудиторий для проведения лекций и практических работ.

Также используется набор презентаций, распечатки с исходными данными для решения задач, плакаты, учебники и методические рекомендации по курсу.

Освоение дисциплины частично производится на базе учебных лабораторий кафедры ТиЭМ ФТФ в СарФТИ НИЯУ МИФИ.

Выполнение практических работ, а также самостоятельной работы студентов осуществляется на рабочих местах, оснащенных ПО, соответствующим тематике дисциплины. Здесь же проводятся консультации по текущим вопросам.

## **8. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**

В соответствии с требованиями ОС ВО по направлению подготовки 15.04.03 «Прикладная механика» реализация компетентностного подхода предусматривает широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков студентов.

В рамках учебного курса студенты работают с лекциями, рекомендованной литературой, выполняют практические работы, готовятся к экзамену. В процессе подготовки студенты используют программные продукты, инструментальные среды, информационно-справочные системы, информационные источники, размещенные в сети Интернет (официальные сайты, веб-порталы, тематические форумы и телекоммуникации), электронные учебники и учебно-методические пособия.

Для достижения планируемых результатов освоения дисциплины «Молекулярная динамика» используются следующие образовательные технологии:

- ✓ использование мультимедийного оборудования при проведении занятий;
- ✓ получение студентом необходимой учебной информации под руководством преподавателя и самостоятельно.
- ✓ проблемные лекции;
- ✓ «работа в команде» - совместная деятельность под руководством лидера, направленная на решение общей поставленной задачи;
- ✓ «междисциплинарное обучение» - использование знаний из разных областей, группируемых и концентрируемых в контексте конкретно решаемой задачи;



- ✓ контекстное обучение;
- ✓ обучение на основе опыта;
- ✓ разбор конкретных постановок экспериментов с поэтапным анализом процесса и обсуждением конечного результата;
- ✓ психологический тренинг с целью безопасного обращения с ВВ, токсичными и радиоактивными материалами;
- ✓ междисциплинарное обучение.
- ✓ консультации;
- ✓ «индивидуальное обучение» - выстраивание для студента собственной образовательной траектории с учетом интереса и предпочтения студента;
- ✓ опережающая самостоятельная работа - изучение студентами нового материала до его изложения преподавателем на лекции и других аудиторных занятиях;
- ✓ встречи с научными сотрудниками ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», занимающимися экспериментами в области физикой прочности;
- ✓ участие в Харитоновских Чтениях ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» и других конференциях;
- ✓ подготовка к олимпиадам и к докладам на студенческих конференциях.

По дисциплине «Молекулярная динамика» в рабочем учебном плане предусмотрены интерактивные часы для проведения практических работ занятий. Для реализации интерактивных форм обучения используются учебно-методические материалы, разработанные сотрудниками кафедры «Теоретической и экспериментальной механики».

## **9. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ СТУДЕНТАМ ПО ОРГАНИЗАЦИИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

Учебным планом на изучение дисциплины отводится один семестр. В конце семестра предусмотрен экзамен.

При преподавании дисциплины методически целесообразно в каждом разделе курса выделить наиболее важные моменты и акцентировать на них внимание обучаемых. Такие моменты отражены в изложенных выше пунктах, касающихся формируемых знаний студентов и их проверки.

При проведении практических занятий студентам прививаются также навыки работы с научной и учебно-методической литературой.

Обязательным является самостоятельная работа студентов дома и в аудитории под руководством преподавателя, выполнение индивидуальных заданий, посещение международных и всероссийских конференций.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО НИЯУ МИФИ к обязательному минимуму содержания основной образовательной программы по направлению подготовки 15.04.03 «Прикладная механика».

**Программу составил:** к.ф-м.н.

А.А. Селезнев

**Рецензент:** доцент кафедры ТиЭМ, к.ф-м.н., доцент

Ю.В. Батьков