

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ИНСТИТУТ ЛАЗЕРНЫХ И ПЛАЗМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

КАФЕДРА ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОДОБРЕНО УМС ИЯФИТ

Протокол № 01/08/24-573.1

от 30.08.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
МЕТОДЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ (ОТДЕЛЬНЫЕ ГЛАВЫ)

Направление подготовки
(специальность)

- [1] 14.03.02 Ядерные физика и технологии
[2] 22.03.01 Материаловедение и технологии
материалов
[3] 14.03.01 Ядерная энергетика и теплофизика

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/ В	СРС, час.	КСР, час.	Форма(ы) контроля, экс./зач./КР/КП
6	4	144	15	30	0		48	15	Э
Итого	4	144	15	30	0	0	48	15	

АННОТАЦИЯ

Дисциплина посвящена методам молекулярно-динамического моделирования физических процессов. Метод молекулярной динамики основан на численном решении уравнений движения Ньютона для систем микрочастиц (атомов, молекул). Такая классическая задача многих тел может быть решена только методами численного интегрирования, поэтому МД моделирование является развивающейся областью приложения методов численного моделирования.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения учебной дисциплины является: изучение основ метода молекулярно-динамического моделирования и получение навыков применения свободнораспространяемого ПО для проведения молекулярно-динамического моделирования свойств веществ.

В процессе изучения студент должен усвоить следующие разделы курса:

- Получить представление об уравнениях движения описывающих поведение атомных ансамблей и методах численного решения динамических уравнений;
- Получить представление о методах расчёта термодинамических параметров состояния вещества по динамическим средним решений уравнений движения.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Для изучения дисциплины необходимы компетенции, сформированные у обучающихся в результате освоения следующих дисциплин:

Математика: обыкновенные дифференциальные уравнения; Математика: математический анализ; Математика: теория функций комплексного переменного; Математика: векторный и тензорный анализ; Физика: механика, молекулярная физика и основы статистической термодинамики ; Уравнения математической физики; Теоретическая физика: Статистическая физика.

Освоение данной дисциплины необходимо при выполнении:

Учебно-исследовательская работа;

Научно-исследовательская работа;

Производственная (в том числе) преддипломная практика

Знания материалов по этой дисциплине необходимы при выполнении выпускной квалификационной работы, а также при практической работе выпускников по специальности.

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
УК-1 [1, 2, 3] – Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для	3-УК-1 [1, 2, 3] – Знать: методики сбора и обработки информации; актуальные российские и зарубежные источники информации в сфере профессиональной деятельности; метод системного анализа

решения поставленных задач	У-УК-1 [1, 2, 3] – Уметь: применять методики поиска, сбора и обработки информации; осуществлять критический анализ и синтез информации, полученной из разных источников В-УК-1 [1, 2, 3] – Владеть: методами поиска, сбора и обработки, критического анализа и синтеза информации; методикой системного подхода для решения поставленных задач
УК-3 [1, 2, 3] – Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде	З-УК-3 [1, 2, 3] – Знать: основные приемы и нормы социального взаимодействия; основные понятия и методы конфликтологии, технологии межличностной и групповой коммуникации в деловом взаимодействии У-УК-3 [1, 2, 3] – Уметь: устанавливать и поддерживать контакты, обеспечивающие успешную работу в коллективе; применять основные методы и нормы социального взаимодействия для реализации своей роли и взаимодействия внутри команды В-УК-3 [1, 2, 3] – Владеть: простейшими методами и приемами социального взаимодействия и работы в команде
УК-6 [1, 2, 3] – Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	З-УК-6 [1, 2, 3] – Знать: основные приемы эффективного управления собственным временем; основные методики самоконтроля, саморазвития и самообразования на протяжении всей жизни У-УК-6 [1, 2, 3] – Уметь: эффективно планировать и контролировать собственное время; использовать методы саморегуляции, саморазвития и самообучения В-УК-6 [1, 2, 3] – Владеть: методами управления собственным временем; технологиями приобретения, использования и обновления социо-культурных и профессиональных знаний, умений, и навыков; методиками саморазвития и самообразования в течение всей жизни

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Духовно-нравственное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование этического мышления и профессиональной ответственности ученого (В2)	1. Использование воспитательного потенциала базовых гуманитарных дисциплин. 2. Разработка новых инновационных курсов гуманитарной и междисциплинарной направленности.
Духовно-нравственное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование личностно-центрированного подхода в профессиональной коммуникации, когнитивно-	1. Использование воспитательного потенциала базовых гуманитарных дисциплин. 2. Разработка новых инновационных курсов гуманитарной и междисциплинарной направленности.

	поведенческих и практико-ориентированных навыков, основанных на общероссийских традиционных ценностях (В3)	
Профессиональное и трудовое воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование глубокого понимания социальной роли профессии, позитивной и активной установки на ценности избранной специальности, ответственного отношения к профессиональной деятельности, труду (В14)	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин естественнонаучного и общепрофессионального модуля для: - формирования позитивного отношения к профессии инженера (конструктора, технолога), понимания ее социальной значимости и роли в обществе, стремления следовать нормам профессиональной этики посредством контекстного обучения, решения практико-ориентированных ситуационных задач. - формирования устойчивого интереса к профессиональной деятельности, способности критически, самостоятельно мыслить, понимать значимость профессии посредством осознанного выбора тематики проектов, выполнения проектов с последующей публичной презентацией результатов, в том числе обоснованием их социальной и практической значимости; - формирования навыков командной работы, в том числе реализации различных проектных ролей (лидер, исполнитель, аналитик и пр.) посредством выполнения совместных проектов. 2.Использование воспитательного потенциала дисциплины «Экономика и управление в промышленности на основе инновационных подходов к управлению конкурентоспособностью», «Юридические основы профессиональной деятельности» для: - формирования навыков системного видения роли и значимости выбранной профессии в социально-экономических отношениях через контекстное обучение
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование научного	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин/практик «Научно-исследовательская работа»,

	мировоззрения, культуры поиска нестандартных научно-технических/практических решений, критического отношения к исследованиям лженаучного толка (B19)	«Проектная практика», «Научный семинар» для: - формирования понимания основных принципов и способов научного познания мира, развития исследовательских качеств студентов посредством их вовлечения в исследовательские проекты по областям научных исследований. 2.Использование воспитательного потенциала дисциплин "История науки и инженерии", "Критическое мышление и основы научной коммуникации", "Введение в специальность", "Научно-исследовательская работа", "Научный семинар" для: - формирования способности отделять настоящие научные исследования от лженаучных посредством проведения со студентами занятий и регулярных бесед; - формирования критического мышления, умения рассматривать различные исследования с экспертной позиции посредством обсуждения со студентами современных исследований, исторических предпосылок появления тех или иных открытий и теорий.
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование способности и стремления следовать в профессии нормам поведения, обеспечивающим нравственный характер трудовой деятельности и неслужебного поведения (B21)	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для развития навыков коммуникации, командной работы и лидерства, творческого инженерного мышления, стремления следовать в профессиональной деятельности нормам поведения, обеспечивающим нравственный характер трудовой деятельности и неслужебного поведения, ответственности за принятые решения через подготовку групповых курсовых работ и практических заданий, решение кейсов, прохождение практик и подготовку ВКР. 2.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального

		модуля для: - формирования производственного коллективизма в ходе совместного решения как модельных, так и практических задач, а также путем подкрепление рационально-технологических навыков взаимодействия в проектной деятельности эмоциональным эффектом успешного взаимодействия, ощущением роста общей эффективности при распределении проектных задач в соответствии с сильными компетентностными и эмоциональными свойствами членов проектной группы.
--	--	---

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Разделы учебной дисциплины, их объем, сроки изучения и формы контроля:

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практик. (семинары) / Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	<i>6 Семестр</i>						
1	Первый раздел	1-8	8/16/0		25	Зд-8	З-УК-3, У-УК-3, В-УК-3, З-УК-6, У-УК-6, В-УК-6, З-УК-1, У-УК-1, В-УК-1
2	Второй раздел	9-15	7/14/0		25	Зд-15	З-УК-1, У-УК-1, В-УК-1, З-УК-3, У-УК-3, В-УК-3, З-УК-6, У-УК-6, В-УК-6
	<i>Итого за 6 Семестр</i>		15/30/0		50		

	Контрольные мероприятия за 6 Семестр				50	Э	3-УК-1, У-УК-1, В-УК-1, 3-УК-3, У-УК-3, В-УК-3, 3-УК-6, У-УК-6, В-УК-6
--	--------------------------------------	--	--	--	----	---	--

* – сокращенное наименование формы контроля

** – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

Обозначение	Полное наименование
Зд	Задание (задача)
Э	Экзамен

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
	<i>6 Семестр</i>	15	30	0
1-8	Первый раздел	8	16	0
1 - 3	Основы молекулярно-кинетической теории вещества Кинетическая теория идеального газа. Давление, внутренняя энергия, температура. Характерные размеры атомов и молекул, длина свободного пробега атомов и частота столкновений. Вязкость, диффузия, теплопроводность газов.	Всего аудиторных часов		
		3	6	0
		Онлайн		
		0	0	0
4 - 5	Понятие о межатомных и межмолекулярных силах. Уравнение состояния реального газа. Потенциальные функции межмолекулярного взаимодействия. Характерные потенциалы межатомного и межмолекулярного взаимодействия.	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		0	0	0
6 - 8	Понятие о методе молекулярной динамики и области её применения Общая характеристика метода молекулярной динамики, места и роли данного метода в современной науке и в технических приложениях. Современное ПО для МД-моделирования. Вспомогательное ПО для визуализации результатов.	Всего аудиторных часов		
		3	6	0
		Онлайн		
		0	0	0
9-15	Второй раздел	7	14	0
9 - 11	Методы молекулярно-динамического моделирования МД моделирование свойств веществ и материалов. Базовые понятия метода молекулярной динамики. Уравнения движения. Расчётная МД ячейка. Периодические граничные условия. Единицы измерения и обезразмеривание уравнений движения при МД	Всего аудиторных часов		
		3	6	0
		Онлайн		
		0	0	0

	моделировании.			
12 - 13	Описание межатомных взаимодействий с помощью межатомных потенциалов Проблема межатомных потенциалов. Природа межатомных и межмолекулярных сил. Приближения Борна-Опенгеймера для описания межатомных взаимодействий. Двухчастичные и многочастичные потенциалы межатомного взаимодействия. Методы определения параметров межатомные потенциалов. Потенциалы для описания свойств металлов. Модель погружённого атома Многочастичные потенциалы для описания ковалентных связей. Потенциал Терзофора и Стиллинжера-Вебера. Ограничения подхода, основанного на модели межатомных потенциалов для описания межатомных взаимодействий.	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		0	0	0
14 - 15	Молекулярно-динамическое моделирование МД моделирование для ансамблей частиц с постоянной температурой и постоянным давлением. Вычисление средних характеристик по результатам МД моделирования. Понятие о фазовых переменных и фазовом пространстве. Эргодическая гипотеза. Методы оптимизации численного решения МД уравнений. Обрезание межатомного потенциала. Списки ближайших соседей. Выбор оптимальных численных схем и шага интегрирования. Параллельные МД коды.	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		0	0	0

Сокращенные наименования онлайн опций:

Обозначение	Полное наименование
ЭК	Электронный курс
ПМ	Полнотекстовый материал
ПЛ	Полнотекстовые лекции
ВМ	Видео-материалы
АМ	Аудио-материалы
Прз	Презентации
Т	Тесты
ЭСМ	Электронные справочные материалы
ИС	Интерактивный сайт

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При реализации программы учебной дисциплины используются образовательные технологии в форме лекций и практических занятия. При проведении работ и проверке самостоятельной работы студентов используются активные формы проведения занятий: совместный поиск решения задачи и компьютерного моделирования поставленной задачи, разбор конкретных ситуаций. Самостоятельная работа студентов подразумевает под собой проработку лекционного материала с использованием рекомендуемой литературы для подготовки к промежуточной аттестации по дисциплине.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

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

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

Компетенция	Индикаторы освоения	Аттестационное мероприятие (КП 1)
УК-1	З-УК-1	Э, Зд-8, Зд-15
	У-УК-1	Э, Зд-8, Зд-15
	В-УК-1	Э, Зд-8, Зд-15
УК-3	З-УК-3	Э, Зд-8, Зд-15
	У-УК-3	Э, Зд-8, Зд-15
	В-УК-3	Э, Зд-8, Зд-15
УК-6	З-УК-6	Э, Зд-8, Зд-15
	У-УК-6	Э, Зд-8, Зд-15
	В-УК-6	Э, Зд-8, Зд-15

Шкалы оценки образовательных достижений

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 – «отлично»	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 – «хорошо»	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 – «удовлетворительно»	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 –	F	Оценка «неудовлетворительно»

	«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.
--	-----------------------	--	--

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. ЭИ К23 Molecular dynamics in multiscale modeling : textbook, Maslov M.M., Katin K.P., Moscow: NRNU MEPhI, 2015
2. ЭИ П 27 Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов, Колдобский Г. И., Перевалов В. П., Москва: Юрайт, 2023
3. ЭИ Ф 80 Уравнения состояния вещества от идеального газа до кварк-глюонной плазмы : учебное пособие, Фортов В. Е., Москва: Физматлит, 2012

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 539.1 К20 Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий : , Каплан И.Г., М.: Наука, 1982
2. 530 Ф87 Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем. От алгоритмов к приложениям : , Френкель Д., Смит Б., Москва: Научный мир, 2013
3. ЭИ Б 12 Физика: геометрия пространства-времени и классическая механика : учебное пособие для вузов, Бабецкий В. И., Мусин Ю. Р., Москва: Юрайт, 2023

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

Специальное программное обеспечение не требуется

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

<https://online.mephi.ru/>

<http://library.mephi.ru/>

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Специальное материально-техническое обеспечение не требуется

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ

Изучение разделов дисциплины, выполнение практических заданий, подготовка к контрольным мероприятиям включает в себя две части: теоретическую и прикладную – непосредственное решение задачи.

В ходе лекционных занятий рекомендуется вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций.

Теоретическая часть предполагает проработку разделов курса, относящихся к лабораторной или курсовой работе. Необходимо определить раздел курса выполняемой работы, уяснить основные понятия, ознакомиться с решениями типовых задач и использовать их при решении задач. После этого следует приступить к решению задания.

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов реализуется посредством работы с рекомендованной литературой (указана в Списке литературы в Рабочей Программе Учебной Дисциплины).

Своевременное и качественное выполнение самостоятельной работы базируется на соблюдении настоящих рекомендаций и изучении рекомендованной литературы. Студентам рекомендуется получить в Библиотечно-информационном центре университета учебную литературу по дисциплине, необходимую для эффективной работы на всех видах аудиторных занятий, а также для самостоятельной работы по изучению дисциплины. Студент может дополнить список использованной литературы современными источниками, не представленными в списке рекомендованной литературы, и в дальнейшем использовать собственные подготовленные учебные материалы при подготовке курсовых работ и выполнении научно-исследовательской работы.

11. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

Для лучшего усвоения материала студентами каждую лекцию следует начинать с напоминания предыдущей лекции (можно в виде вопросов) и пояснения ее связи с предстоящей. Также завершать лекцию следует подведением ее краткого итога с указанием темы следующей лекции и ее связи с прошедшей.

На протяжении лекции полезно поддерживать интерактивность между лектором и студентами в виде вопросов в аудиторию. Важно задавать вопросы на знание материала из прошедших лекций или других курсов по мере обращения к нему или, по крайней мере, проговаривать их связь. Этим самым студенты могут почувствовать связь между различными навыками и их востребованность. Также важно постоянно задавать вопросы, озадачивающие студентов поднимаемой проблемой в рамках обсуждаемой темы (даже если она совсем частного характера), стимулируя внимание и творческое участие студента в ходе рассуждений лектора.

Важно разъяснять происхождение вводимых терминов.

Автор(ы):

Селезнев Александр Аркадьевич