

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 ЛАПЛАЗ Протокол №1/08-577 от 29.08.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ И МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Направление подготовки
(специальность)

[1] 03.03.01 Прикладные математика и физика

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, экз./зач./КР/КП
8	1	36	12	12	0		12	0	3
Итого	1	36	12	12	0	0	12	0	

АННОТАЦИЯ

В рамках дисциплины изучаются основы химической термодинамики сложных химических систем, методики решения задач термодинамики с двумя заданными постоянными термодинамическими параметрами на основе метода экстремума характеристических функций, а также ознакомление с основами методов молекулярной динамики. Сопоставление результатов термодинамического и молекулярно-динамического моделирования изотермического сжатия газовых систем.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения учебной дисциплины являются:

- ознакомление студентов с методами термодинамических расчётов основных термодинамических состояний и состояний в стационарных газодинамических процессах сложных химических систем;
- получение навыка практического проведения расчётов основных термодинамических состояний и состояний в стационарных газодинамических процессах сложных химических систем;
- получение представления об уравнениях движения, описывающих поведение атомных ансамблей и методах численного решения динамических уравнений;
- ознакомление с открытыми программными пакетами для проведения молекулярно-динамического моделирования и способами визуализации результатов;
- 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
--------------------------------	--

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

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	Объект или область знания	Код и наименование профессиональной компетенции; Основание (профессиональный стандарт-ПС, анализ опыта)	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
научно-исследовательский			
Проведение научных и аналитических исследований по отдельным разделам (этапам, заданиям) темы (проекта) в рамках предметной области по профилю специализации в соответствии с утвержденными планами и методиками исследований. участие в проведении наблюдений и измерений, выполнении эксперимента и обработке данных с использованием современных компьютерных технологий; участие в проведении теоретических исследований, построении физических, математических и компьютерных моделей изучаемых процессов и явлений, в проведении аналитических исследований в предметной области по профилю специализации;	Деятельность по разработке материалов, покрытий, приборов	ПК-4 [1] - Способен критически оценивать применяемые методики и методы исследования <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 06.001, 25.049, 40.008, 40.011	З-ПК-4[1] - Знать основные методики и методы исследования в сфере своей профессиональной деятельности ; У-ПК-4[1] - Уметь анализировать и критически оценивать применяемые методики и методы исследования.; В-ПК-4[1] - Владеть навыками выбора и критической оценки применяемых методик и методов исследования в сфере своей профессиональной деятельности

участие в создании новых методов и технических средств исследований и новых разработок;			
инновационный			
Сбор и анализ информационных источников и исходных данных для планирования и разработки исследовательских проектов; проведение фундаментальных и прикладных математических и физических исследований, направленных на решение инженерных, технических и информационных задач; участие в модернизации существующих, разработке и внедрении новых методов контроля качества материалов, производственно-технологических процессов и готовой продукции в сфере высоких и наукоемких технологий.	информационные источники и исходные данные для планирования новых проектов, разработки новых методов производства и контроля продукции	ПК-6 [1] - Способен к участию в разработке и реализации проектов по интеграции высшей школы, академической и отраслевой науки, промышленных организаций и предприятий малого и среднего бизнеса <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 06.022, 26.003, 40.008, 40.011	З-ПК-6[1] - Знать основные принципы и возможности интеграции высшей школы, академической и отраслевой науки, промышленных организаций и предприятий малого и среднего бизнеса. ; У-ПК-6[1] - Уметь принимать участие в разработке и реализации проектов по интеграции высшей школы, академической и отраслевой науки, промышленных организаций и предприятий малого и среднего бизнеса. ; В-ПК-6[1] - Владеть навыками участия в разработке и реализации проектов по интеграции высшей школы, академической и отраслевой науки, промышленных организаций и предприятий
педагогический			
Организация лабораторных занятий, подготовка учебно-методических материалов и оборудования.	образовательный процесс в области основных направлений физики твердого тела	ПК-12 [1] - Способен преподавать специальные предметы в области прикладной и фундаментальной физики. <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 01.001, 01.003	З-ПК-12[1] - Знать основные цели и задачи, особенности содержания и организации педагогического процесса на основе компетентностного подхода; психологические особенности

			обучающихся, особенности педагогического взаимодействия в условиях изменяющегося образовательного пространства. ; У-ПК-12[1] - Уметь организовывать образовательно-воспитательный процесс в изменяющихся социокультурных условиях; применять психолого-педагогические знания в области общей, прикладной и фундаментальной физики.; В-ПК-12[1] - Владеть навыками преподавания специальных дисциплин в области общей, прикладной и фундаментальной физики.
--	--	--	---

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование чувства личной ответственности за научно-технологическое развитие России, за результаты исследований и их последствия (B17)	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования чувства личной ответственности за достижение лидерства России в ведущих научно-технических секторах и фундаментальных исследованиях, обеспечивающих ее экономическое развитие и внешнюю безопасность, посредством контекстного обучения, обсуждения социальной и практической значимости результатов научных исследований и технологических разработок. 2.Использование воспитательного потенциала дисциплин

		профессионального модуля для формирования социальной ответственности ученого за результаты исследований и их последствия, развития исследовательских качеств посредством выполнения учебно-исследовательских заданий, ориентированных на изучение и проверку научных фактов, критический анализ публикаций в профессиональной области, вовлечения в реальные междисциплинарные научно-исследовательские проекты.
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование ответственности за профессиональный выбор, профессиональное развитие и профессиональные решения (B18)	Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования у студентов ответственности за свое профессиональное развитие посредством выбора студентами индивидуальных образовательных траекторий, организации системы общения между всеми участниками образовательного процесса, в том числе с использованием новых информационных технологий.
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.
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование культуры безопасности при работе с лазерным излучением (B27)	1.Использование воспитательного потенциала профильных дисциплин и всех видов практик для: - формирования культуры лазерной безопасности посредством тематического акцентирования в содержании дисциплин и учебных заданий, подготовки эссе, рефератов, дискуссий, а также в ходе практической работы с лазерным оборудованием. - формирования культуры безопасности при работе на экспериментальных и промышленных установках высокой мощности и имеющими повышенный уровень опасности через выполнение студентами практических и лабораторных работ, в том числе на оборудовании для исследования высокотемпературной плазмы.
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование культуры безопасности при работе на экспериментальных и промышленных установках высокой мощности (B28)	1.Использование воспитательного потенциала профильных дисциплин и всех видов практик для: - формирования культуры лазерной безопасности посредством тематического акцентирования в содержании дисциплин и учебных заданий, подготовки эссе, рефератов, дискуссий, а также в ходе практической работы с лазерным оборудованием. - формирования культуры безопасности при работе на экспериментальных и промышленных установках высокой мощности и имеющими повышенный уровень опасности через выполнение студентами практических и лабораторных работ, в том числе на оборудовании для исследования высокотемпературной плазмы.

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

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

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практи. (семинары) / Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
-------	---	--------	--	---	-------------------------------	-------------------------------------	---------------------------------

* – 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)

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
--------	---------------------------	------------	----------------	------------

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)
ПК-12	З-ПК-12	З, Зд-8, Зд-12
	У-ПК-12	З, Зд-8, Зд-12
	В-ПК-12	З, Зд-8, Зд-12
ПК-4	З-ПК-4	З, Зд-8, Зд-12
	У-ПК-4	З, Зд-8, Зд-12
	В-ПК-4	З, Зд-8, Зд-12
ПК-6	З-ПК-6	З, Зд-8, Зд-12
	У-ПК-6	З, Зд-8, Зд-12
	В-ПК-6	З, Зд-8, Зд-12

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 твердо 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,
60-64			

			нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
Ниже 60	2 – «неудовлетворительно»	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.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. ЭИ К 20 Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы : учебное пособие, Каплан И. Г., Москва: Лаборатория знаний, 2017
2. ЭИ М 64 Молекулярная физика и термодинамика в вопросах и задачах : , Салецкий А. М., Брандт Н. Н., Миронова Г. А., Санкт-Петербург: Лань, 2022
3. ЭИ Т 33 Теоретическая физика Т. 9 Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния, , , 2021
4. 536 Ф80 Уравнения состояния вещества от идеального газа до кварк-глюонной плазмы : , Фортов В.Е., Москва: Физматлит, 2013

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 536 Г93 Термодинамические расчеты сложных химических систем : Учеб.пособие, Одинцов В.В., Губин С.А., Пепекин В.И., М.: МИФИ, 1987

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.

Теоретическая часть предполагает проработку разделов курса, относящихся к практической или контрольной работе. Необходимо определить раздел курса выполняемой работы, уяснить вывод основных закономерностей и использовать их при решении задач, ознакомиться с решениями типовых задач, приведенных в рекомендуемой литературе. После этого следует приступить к решению задания.

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.

В ходе подготовки к практическим занятиям необходимо изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, новыми публикациями в периодических изданиях: журналах, газетах и т.д. При этом учесть рекомендации преподавателя и требования учебной программы. Дорабатывать свой конспект лекции, делая в нем соответствующие записи из литературы, рекомендованной преподавателем и предусмотренной учебной программой. Подготовить тезисы для выступлений по всем учебным вопросам, выносимым на практическое занятие. Готовясь к докладу или реферативному сообщению, обращаться за методической помощью к преподавателю. Составить план-конспект своего выступления. Продумать примеры с целью обеспечения тесной связи изучаемой теории с реальной жизнью.

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 написании курсовых и дипломных работ. В процессе подготовки к занятиям рекомендуется взаимное обсуждение материала, во время которого закрепляются знания, а также приобретает практика в изложении и разъяснении полученных знаний, развивается речь.

При необходимости следует обращаться за консультацией к преподавателю. Идя на консультацию, необходимо хорошо продумать вопросы, которые требуют разъяснения.

Успешное освоение курса предполагает активное, творческое участие студента путем планомерной, повседневной 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):

Губин Сергей Александрович, д.ф.-м.н., профессор

Богданова Юлия Андреевна