

ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

УТВЕРЖДЕНО:

на заседании кафедры  
протокол № 7 от « 25 » апреля 2019 г.

Зав. кафедрой



/ Мулюков Р.Р.

СОГЛАСОВАНО:

Согласовано:  
Председатель УМК факультета /института



/ Балапанов М.Х.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

дисциплина Классические методы моделирования наноматериалов и процессов нанотехнологии

*(наименование дисциплины)*

базовая

*(Цикл дисциплины и его часть (базовая, вариативная, дисциплина по выбору))*

**программа бакалавриата**

Направление подготовки (специальность)

**28.03.03 Наноматериалы**

*(код и наименование направления подготовки (специальности))*

Направленность (профиль) подготовки

**«Объемные наноструктурные материалы»**

*(наименование направленности (профиля) подготовки)*

Квалификация

**бакалавр**

Разработчики (составители)

профессор, д.ф.-м.н., профессор РАН

*(должность, ученая степень, ученое звание)*



/ Баимова Ю.А.

*(подпись, Фамилия И.О.)*

Для приема: 2019г.

Уфа 2019 г.

Составитель / составители: профессор, д.ф.-м.н., Баимова Ю.А.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры физики и технологии наноматериалов протокол от « 25 » апреля 2019г. № 7

Заведующий кафедрой

—  / Мулюков Р.Р.

### Список документов и материалов (оглавление)

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы	5
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся) - (Приложение №1)	6 (19)
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	7
4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания	7
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	10
4.3. Рейтинг-план дисциплины (Приложение №2)	24
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	16
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	16
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины	16
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	18

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

При изучении дисциплины «Классические методы моделирования наноматериалов и процессов нанотехнологии» у обучающегося должны формироваться следующие компетенции:

ОПК-1: способностью применять базовые знания математических и естественнонаучных дисциплин, дисциплин общепрофессионального цикла в объеме необходимом в профессиональной деятельности основных законов соответствующих наук, разработанных в них подходов, методов и результатов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования;

ОПК-3: способностью применять основы методов исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств наноматериалов и наносистем неорганической и органической природы, в твердом, жидком, гелеобразном, аэрозольном состоянии, включая нанопленки и наноструктурированные покрытия, внутренние и внешние границы раздела фаз, а также физических и химических процессов в них или с их участием;

ПК-4: способностью применять навыки использования (под руководством) методов моделирования, оценки, прогнозирования и оптимизации технологических процессов и свойств наноматериалов, стандартизации и сертификации материалов и процессов;

Для формирования указанных компетенций и освоения образовательной программы обучающийся должен показать следующие результаты обучения по дисциплине:

Результаты обучения		Формируемая компетенция (код)	Примечание
Знания	1. Знать математические основы метода классической молекулярной динамики	ОПК-1	
	2. Знать физические основы метода классической молекулярной динамики	ОПК-1	
	3. Знать основные научные программы, реализующие метод молекулярной динамики и структурный анализ результатов моделирования.	ОПК-1, ОПК-3	
Умения	1. Использовать знания, полученные при изучении физических основ метода молекулярной динамики, при исследовании структуры конденсированных сред и процессов в них	ОПК-1, ПК-4	
	2. Выбирать метод моделирования и описания межатомных взаимодействий для исследования конкретных физических систем	ОПК-3	
Владения (навыки / опыт деятельности)	1. Владеть навыками проведения исследований структуры конденсированных сред и процессов в них с использованием метода молекулярной динамики.	ОПК-3, ПК-4	
	2. Владеть навыками использования научных программ, реализующих метод молекулярной динамики и анализа атомной структуры металлов и сплавов по результатам моделирования.	ПК-4	

## **2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина «Классические методы моделирования наноматериалов и процессов нанотехнологии» является дисциплиной по выбору вариативной части ООП ВО по направлению подготовки 28.28.02 "Нanomатериалы".

Дисциплина изучается на 3 курсе в 6 семестре.

Цели изучения дисциплины: «Классические методы моделирования наноматериалов и процессов нанотехнологии»

Целью изучения дисциплины «Классические методы моделирования наноматериалов и процессов нанотехнологии» является формирование у студентов навыков и умений, позволяющих проводить исследования структуры и свойств металлов и сплавов, в том числе наноструктурных, а также других типов наноматериалов, например наноразмерных полиморфов углерода, путем компьютерного моделирования.

Для освоения дисциплины «Классические методы моделирования наноматериалов и процессов нанотехнологии» студентам необходимы знания, умения и навыки, полученные ими при изучении курсов «Математика», «Физика» и «Информатика и ИКТ» в школе и в рамках дисциплин «Информатика и ИКТ» и «Программирование», «Общая физика», «Методы математического моделирования» и «Высшая математика» в университете.

Чтобы приступить к изучению дисциплины «Классические методы моделирования наноматериалов и процессов нанотехнологии» студент должен знать основные понятия и законы перечисленных выше дисциплин, быть знакомым с программированием и понятием алгоритмов, а также с базовыми компьютерными программами для математического моделирования.

Освоение данного предмета является одним из необходимых элементов подготовки специалистов по данному профилю...

## **3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)**

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

#### 4. Фонд оценочных средств по дисциплине

##### 4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Код и формулировка компетенции

ОПК-3: способностью применять основы методов исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств наноматериалов и наносистем неорганической и органической природы, в твердом, жидком, гелеобразном, аэрозольном состоянии, включая нанопленки и наноструктурированные покрытия, внутренние и внешние границы раздела фаз, а также физических и химических процессов в них или с их участием;

ПК-2: способностью применять навыки сбора данных, изучения, анализа и обобщения научно-технической информации по тематике исследования, разработки и использования технической документации, основных нормативных документов по вопросам интеллектуальной собственности, подготовки документов к патентованию, оформлению ноу-хау;

ПК – 4: способностью применять навыки использования (под руководством) методов моделирования, оценки, прогнозирования и оптимизации технологических процессов и свойств наноматериалов, стандартизации и сертификации материалов и процессов;

Этап, уровень освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения					Оценочные средства
		1	2	3	4	5	
Первый этап Пороговый уровень	Знать: 1) теоретические основы математического моделирования; 2) методы решения уравнений математической физики	Не знает	Имеет частичные знания об основах математического моделирования и методах решения уравнений	В целом знает основы математического моделирования и методы решения уравнений	Знает основы математического моделирования и методах решения уравнений, но допускает незначительные ошибки	Знает основы математического моделирования и методы решения уравнений, умеет применять на практике	Практические задания; собеседование
Второй этап Базовый уровень	Уметь: 1) знать современное программное обеспечение для моделирования методом молекулярной динамики; 2) анализировать применимость конкретного метода и потенциала для решения поставленной задачи	Не умеет	Имеет частичные знания о современном программном обеспечении; Не умеет анализировать применимость конкретного метода для решения поставленной задачи	В целом знает современное программное обеспечение; Не в полной мере может проанализировать применимость конкретного метода для решения поставленной задачи	Знает современное программное обеспечение, может провести анализ методов математической физики, но допускает незначительные ошибки	Знает современное программное обеспечение; Анализирует применимость конкретного метода для решения поставленной задачи	Устный опрос; коллоквиум
Третий этап Повышенный уровень	Владеть: 1) знаниями об использовании математического программного обеспечения в	Не владеет	Слабо владеет знаниями об использовании математического программного обеспечения;	Владеет знаниями об использовании математического программного обеспечения; Но не владеет	Владеет знаниями об использовании математического программного обеспечения, но допускает	Владеет в полной мере знаниями об использовании математического программного обеспечения;	Зачет

	научном исследовании; 2) уметь применять современные методы решения уравнений для проведения научных исследований;		- не владеет навыками применения методов математической физики.	навыками применения методов математической физики	незначительные ошибки; в целом умеет применять знания на практике.	- методиками решения уравнений; - навыками применения методов математической физики.	
--	---	--	---	---	---	---	--

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины.

**4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций**

Результаты обучения		Формируемая компетенция (код)	Примечание
Знания	1. Знать основные понятия методов математической физики и моделирования, использующихся при изучении общетеоретических и специальных дисциплин и в инженерной практике	ОПК-3	
	2. Знать методологию, методы и приемы проведения количественного анализа и моделирования поведения технических систем, событий и процессов нанотехнологий	ОПК-3	
	3. Знать методы теоретического исследования в области решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3, ПК-2	
	4. Знать назначение и технологию эксплуатации аппаратного и программного обеспечения, применяемого в профессиональной деятельности для моделирования процессов и материалов	ОПК-3, ПК-2	
Умения	1. Пользоваться математической литературой для самостоятельного изучения инженерных вопросов	ОПК-3, ПК-4	
	2. Применять знания о принципах моделирования для создания собственных алгоритмов при решении конкретных задач физики	ОПК-3, ПК-4	
	3. Умение использовать данные моделирования для более глубокого понимания процессов на микро- и нано- уровнях описания веществ	ОПК-3, ПК-2, 4	

Владения (навыки / опыт деятельности)	1. Владеть современными методами математической физики; методами построения математических моделей для задач, возникающих в инженерной практике, и численными методами их решения	ОПК-3, ПК-2,4	
	2. Владеть навыками использования атомистического моделирования для решения исследовательских и прикладных задач.	ПК-4	

### 4.3 Рейтинг-план дисциплины

Рейтинг–план дисциплины представлен в приложении 2.

#### Экзаменационные билеты

Зачет является оценочным средством для всех этапов освоения компетенций.

Структура зачета:

*Билет состоит из одного теоретического вопроса и одного практического задания, выполняемого на компьютере.*

Примерные вопросы для зачета:

1. На каком приближении квантовой теории основано понятие классического потенциала взаимодействия атомов?
2. Какой характер имеет взаимодействие атомов в конденсированных средах (указать все основные особенности).
3. Дать понятие парных потенциалов. В чем их приближенность?
4. Записать выражения для наиболее известных парных потенциалов и описать смысл их подгоночных параметров. Нарисовать качественный график и указать основные характерные точки.
5. Что такое обрезание потенциала и зачем оно нужно? Какие значения имеет радиус обрезания?
6. Перечислить недостатки парных потенциалов.
7. Записать общий вид выражения для энергии атома в теории функционала плотности и описать ее составляющие.
8. Записать вид выражения для энергии атома в модели погруженного атома и объяснить все функции, входящие в него. Объяснить многочастичный характер метода.
9. Межатомные потенциалы для бинарных сплавов.
10. Межатомные потенциалы для ковалентных кристаллов.
11. Назвать и охарактеризовать методы минимизации энергии атомных систем. В чем сложность этой процедуры в плане поиска глобального минимума?
12. Объяснить и записать суть метода МД.
13. Перечислить примеры задач физики конденсированного состояния, решаемых методом МД.
14. Описать ограничения классической МД.
15. Описать роль поверхности при моделировании и расчетной ячейки.
16. Объяснить периодические граничные условия.
17. В чем состоит правило ближайшей частицы в МД и к какому ограничению на расчетную ячейку оно приводит?
18. Записать алгоритм Верле для решения уравнений движения в МД.
19. Объяснить использование и роль списка соседей в МД.



20. Расчет кинетической, потенциальной и полной энергии в МД.
21. Как строится калорическая кривая в МД? Как определить температуру плавления объемных кристаллов и наночастиц?
22. Как рассчитать коэффициент диффузии в МД?
23. Расчет давления в МД.
24. Задание начальной температуры системы в МД.
25. Методы моделирования систем с постоянной температурой: пропорциональный и дифференциальный термостаты.
26. Методы моделирования систем с постоянной температурой: термостат Андерсена (стохастический метод).
27. Моделирование систем с постоянным давлением: пропорциональный и дифференциальный баростаты.
28. Координационный анализ структуры металлов.
29. Параметр центральной симметрии.
30. Анализ структуры металлов с помощью радиальной функции распределения.
31. Программа молекулярно-динамического моделирования LAMMPS. Ее использование. Основные команды LAMMPS.

В рамках использования модульно-рейтинговой системы обучения и оценки успеваемости студентов итоговая оценка знаний студента по дисциплине производится по сумме баллов, полученных в рамках текущего и рубежного контроля знаний, умений и навыков в течение семестра, и баллов, полученных на зачете.

За работу в семестре студент получает до 70 баллов за выполнение заданий в рамках текущего и рубежного контроля и дополнительно до 10 баллов за результаты участия в олимпиаде студентов по общей физике. Для допуска к зачету студент должен набрать в семестре не менее 35 баллов.

Максимальное количество баллов, получаемое студентом на зачете, составляет 30 баллов.

*Для зачета:*

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),  
не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов).

### **Критерии оценивания ответа на зачете:**

#### **(30 баллов)**

Ответ на вопрос должен показать глубокие, прочные знания студента. Ответ должен быть логичным и доказательным. Студенту необходимо знать основные понятия, термины, развернутые определения, использовать современные данные науки. Студент должен устанавливать причинно-следственные связи, применять знания в новой ситуации. Студент должен продемонстрировать умение делать аргументированные выводы.

#### **(20 баллов)**

Ответ студента должен показать глубокие, прочные знания. Ответ должен быть логичным и доказательным. Студенту необходимо знать основные понятия, термины, развернутые определения, использовать данные современной науки. Студенту необходимо устанавливать причинно-следственные связи, излагать материал с учетом принципов объективности и научности. В ответе допускаются отдельные несущественные неточности.

#### **(10 баллов)**

Ответ на вопросы должен показать знания поставленных вопросов. Необходимо знать основные понятия, термины, развернутые определения, фактический материал, использовать данные современной науки. В ответе могут допускаться существенные ошибки и неточности.

#### **(0 баллов)**

Ответ на поставленные вопросы показывает незнание его содержания, основных понятий, терминов. Студент не умеет устанавливать причинно-следственные связи, излагать

материал с учетом принципов научности и объективности, анализировать указанные источники. Ответ студента не соответствует вопросу, а так же при отсутствии ответа и при отказе от ответа.

При изучении дисциплины «Классические методы моделирования наноматериалов и процессов нанотехнологии» текущий контроль осуществляется в виде устного опроса (5 баллов за семестр); допуска, выполнения лабораторных работ, оформления и защиты отчета (35 баллов). Рубежный контроль проводится в форме письменного опроса (три опроса по 10 баллов, всего за семестр 30 баллов). По учебному плану итоговый контроль проводится в форме зачета (30 баллов).

Преподаватель может поощрить студентов за участие в научных конференциях, конкурсах, олимпиадах, за активную работу на аудиторных занятиях, за публикации статей, за работу со школьниками, выполнение заданий повышенной сложности в виде поощрительных баллов (до 10 баллов за семестр).

Перевод оценки из 100-балльной системы:

- зачтено - от 50 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- не зачтено - менее 50 баллов;

## Задания для контрольных работ

*Типовые задачи, предлагаемые на семинарских занятиях и контрольных*

1. Вывести выражение для силы в системе, взаимодействие в которой описывается потенциалом Ленарда-Джонса. Вывести связи между параметрами потенциала и характеристиками системы (параметром решетки, энергией связи).
2. Вывести выражение для силы в системе, взаимодействие в которой описывается потенциалом Морзе. Вывести связи между параметрами потенциала и характеристиками системы (параметром решетки, энергией связи, упругими модулями).
3. Создать с помощью инструментов, встроенных в программу VMD, структуру графита, состоящего из 7 слоев, где атомы показаны сферами, а связи линиями на белом фоне.
4. Записать список команд программы LAMMPS, задающий проведение МД расчетов в течение 120 пс (шаг выбрать самостоятельно) при температуре 1000 К при постоянном давлении и последующую релаксацию до состояния с минимальной энергией.

### **Описание методики оценивания письменных задач:**

- 5 баллов выставляется студенту, если ответы на вопросы были даны верно;
  - 4 балла выставляется студенту, если при верном ответе на вопрос в общем виде допущены незначительные ошибки в понятиях;
  - 3 балла выставляется студенту, если отсутствует ответ на один из вопросов или допущена принципиальная ошибка в ответах;
  - 1-2 балла выставляется студенту, если верно записана только часть ответа или ответы ошибочны.
- 0 баллов ставится при отсутствии ответа или при полностью неверном ответе или когда ответ не соответствует поставленному вопросу.

## **5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

### **5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины**

#### **Основная литература:**

1. Назаров А.А. Принципы и методы многоуровневого моделирования структуры материалов: приложения к наноструктурным металлам. В кн.: Всероссийская школа-конференция для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании». Лекции. Том 1. Математика, физика, химия.- Уфа, БГУ, 2008. с. 103-118.

2. Назаров А.А., Мулюков Р.Р. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии. Уфа: БашГУ, 2010.

3. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наук. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1990.

4. Мансури Г.А. Принципы нанотехнологии. Исследование конденсированных веществ малых систем на молекулярном уровне. М.: Мир, 2008.

#### **Дополнительная литература:**

1. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х томах). М.: Мир, 1990.

2. Рит М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. РХД, 2005.

### **5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины**

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

<http://lammmps.sandia.gov/>

**6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.**

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине приведена в таблице:

Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий	Вид занятий	Наименование оборудования, программного обеспечения
<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>
Лекционная аудитория 415	Лекции	Доска, компьютер, мультимедийный проектор, экран
<i>учебная аудитория для проведения лабораторных занятий на компьютерах:</i> аудитория № 412	Лабораторные работы	Доска, мел, компьютеры

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ФИЗИКО - ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

**СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ**

дисциплины «Классические методы моделирования наноматериалов и процессов нанотехнологии» на 6 семестр  
(наименование дисциплины)

очная

форма обучения

Виды учебной работы	Количество часов по семестрам	
	Общий объем по РУП 108	№ семестра 6
Аудиторные занятия	42	42
Лекции	16	16
Лабораторные занятия	32	32
Практические занятия	16	16
Самостоятельная работа студентов	42	42
Контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2
Виды контроля	зачет	зачет

Форма контроля:

зачет 6 семестр

№ п.п.	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов (СРС)	Форма текущего контроля успеваемости
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СР			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	<b>Модуль 1. Общая характеристика методов моделирования материалов, описание межатомного взаимодействия в конденсированных средах и визуализация атомных систем.</b> Введение. Общая характеристика методов моделирования в физике материалов. Роль компьютерного моделирования в физике материалов и в нанотехнологии. Уровни описания структуры материалов. Общая характеристика и классификация методов компьютерного моделирования материалов. Моделирование из первых принципов. Атомистическое моделирование. Дислокационное, микро- и макро-механическое моделирование.	2			4	[1]; [2], Введение	Понятие о многоуровневом описании и методах моделирования материалов [1]	Тест
2	Потенциалы межатомного взаимодействия в классической молекулярной динамике. Квантовомеханическое обоснование классического межатомного потенциала. Парные потенциалы и их недостатки. Современные многочастичные потенциалы. Модель погруженного атома.	2	2	2	4	2, § 1.1-1.4 3 (с.60-69) 4, гл.2	Межатомные потенциалы для бинарных сплавов и ковалентных кристаллов [2] § 1.5, 1.6	Тест
3	Компьютерная визуализация атомных систем. Изучение и освоение программы визуализации VMD.	2		2	4	[2], Л. п. № 1	Методы и программы визуализации результатов атомного	Защита отчета

							моделирования	
8	<b>Модуль 2. Основы молекулярной динамики.</b> Методы атомистического моделирования твердых тел. Методы минимизации энергии (молекулярная статика). Основы метода молекулярной динамики (МД). Суть метода МД. Связь МД со статистической физикой. Задачи, решаемые с помощью МД. Ограничения классической МД. Ячейка моделирования. Граничные условия. Правило ближайшей частицы. Список соседей.	2	2	4	6	[2], § 2, 3.1-3.6, 3.9 3, гл. 3 4, гл.5 [2], Л. п. № 2	Численные методы решения уравнений движения в молекулярной динамике 2, § 3.7, 3.8	Контрольная работа, решение задач  Защита отчета
9	Расчет структурных и термодинамических параметров в молекулярной динамике. Кинетическая, потенциальная и полная энергии. Калорическая кривая. Определение температуры плавления объемных кристаллов и наночастиц. Расчет коэффициента диффузии. Расчет давления в МД.	2	2	4	6	2, § 4.1-4.7 3, гл. 3 4, гл.5 [2], Л. п. № 3	Атомные напряжения и их расчет в молекулярной динамике [2], §4.7	Выборочный опрос, контрольная работа, Защита отчета
10	<b>Модуль 3. Моделирование физических систем и процессов методом молекулярной динамики</b> Моделирование систем с постоянными давлением и температурой. Задание исходной температуры при моделировании. Термостат Андерсена, интегральный метод, дифференциальный и пропорциональный термостаты для моделирования систем при постоянной температуре. Метод расширенной системы, ограничивающих условий при моделировании с постоянным давлением. Метод Паринелло и Рамэна	2	3	4	6	2, § 5.1-5.3 3, гл. 3 4, гл.5 [2], Л. п. № 5,8	Проведение расчетов методом молекулярной динамики	Защита отчета
11	Научные программы, реализующие метод МД. Программы XMD, LAMMPS. Команды LAMMPS.	2	4	8	6	2, § 6.1-6.3 [2], Л. п. № 4	Проведение расчетов методом молекулярной динамики	Выборочный опрос, контрольная работа, Защита отчета
12	Методы анализа атомной структуры при моделировании. Координационный анализ. Параметр центральной	2	4	8	6	2, § 8.1-8.4 [2], Л. п. № 7	Визуализация атомных энергий	Выборочный опрос,



симметрии. Анализ общих соседей атомных пар. Визуализация дефектов: точечные дефекты, дислокации, дефекты упаковки, границы зерен. Различение г.ц.к. и г.п.у. структур. Радиальная функция распределения						и напряжений	контрольная работа, Защита отчета
<b>Всего часов:</b>	<b>16</b>	<b>16</b>	<b>32</b>	<b>42</b>			зачет

**Примечание 1.** Сокращение в таблице: КР – контрольная работа.

**Примечание 2.** Лабораторные работы по методам моделирования описаны в рабочей программе дисциплины «Классические методы моделирования наноматериалов и процессов нанотехнологии».

**Примечание 3.** Часы на самостоятельную работу включают время на подготовку к зачету (контроль).

**Примечание 4.** В таблицу не включено 1.7 часа ФКР (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности во время семестра, подразумевающие контактную работу обучающихся с преподавателем) .

## Рейтинг – план дисциплины

«Классические методы моделирования наноматериалов и процессов нанотехнологии»

(название дисциплины согласно рабочему учебному плану)

направление «Наноматериалы», профиль «Объемные наноструктурные материалы»курс 3, семестр 6

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			Минимальный	Максимальный
<b>Модуль 1 «Общая характеристика методов моделирования материалов, описание межатомного взаимодействия в конденсированных средах и визуализация атомных систем»</b>				
<b>Текущий контроль</b>				
Тест №1	4	5	0	5
<b>Рубежный контроль</b>				
1. Контрольная работа №1	5	3	0	10
<b>ВСЕГО ПО МОДУЛЮ 1</b>			<b>0</b>	<b>15</b>
<b>Модуль 2 «Основы молекулярной динамики»</b>				
<b>Текущий контроль</b>				
3. Контрольная работа №2	5	4	0	10
<b>Рубежный контроль</b>				
1. Тест №2	3	5	0	15
<b>ВСЕГО ПО МОДУЛЮ 2</b>			<b>0</b>	<b>25</b>
<b>Модуль 3. «Моделирование физических систем и процессов методом молекулярной динамики»</b>				
<b>Текущий контроль</b>				
3. Контрольная работа №3	5	4	0	10
<b>Рубежный контроль</b>				
1. Тест №3	3	5	0	10
<b>Поощрительные баллы</b>				
Выполнение дополнительных заданий			0	10
<b>Итого поощрительных баллов</b>			<b>0</b>	<b>10</b>
<b>Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)</b>				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6
2. Посещение практических занятий			0	-10
<b>Итоговый контроль</b>				
<b>Зачет</b>	9 (вопрос билета)	2 вопроса	Макс. 18 б.	<b>54</b>
	3 (доп. вопрос)	2	Макс. 6 б.	
	6 (задача)	1	Макс. 6 б.	