

03.04.01 Прикладные математика и физика

Очная форма обучения, 2017 года набора

Аннотации рабочих программ дисциплин

Аналитическая химия

Цель дисциплины:

освоение студентами основных приемов и методов количественного химического анализа

Задачи дисциплины:

Основными задачами курса является формирование у студентов следующих умений и навыков:

- аккуратности и точности при проведении эксперимента
- работы с аналитической посудой
- работы с химическими веществами
- по приготовлению растворов точных концентраций
- титриметрического анализа
- гравиметрического анализа
- фотометрического анализа

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основные методы количественного химического анализа (гравиметрический, титриметрический, фотометрический и т.д.)
- правила работы в аналитической лаборатории
- методы обработки данных количественного химического анализа

Уметь:

1) работать с лабораторным аналитическим оборудованием:

- аналитическими весами
- рН-метром
- фотоэлектроколориметром

- термостатами
- аналитической посудой и приспособлениями
- бюретками
- стандартными образцами и стандарт-титрами

2) приготавливать:

- растворы заданных (точных) концентраций

3) определять:

- концентрации веществ в растворах, материалах, средах в широких диапазонах

4) выбирать методики количественного химического анализа

Владеть:

методами:

- титриметрического анализа
- фотометрического анализа
- гравиметрического анализа
- обработки результатов количественного химического анализа

К содержанию дисциплины относятся основные разделы курса:

- Сведения о количественном химическом анализе. Аналитическая посуда и средства измерений.
- Титриметрические методы анализа. Кислотно-основное титрование.
- Комплексонометрическое титрование
- Окислительно-восстановительное титрование. Перманганатометрия. Йодометрия.
- Фотометрический анализ
- Гравиметрический анализ
- Промежуточная аттестация (зачет)

Основная литература:

1. Практический курс общей химии [Текст] = учеб. пособие для студентов вузов по направлению "Прикладные математика и физика" / М-во образования и науки РФ, Моск. физ.-техн. ин-т (гос. ун-т) ; [В. В. Зеленцов и др.] .— 4-е изд., испр. и доп. — М. : МФТИ, 2012 .— 305 с.
2. Методические указания к лабораторным работам по курсу "Аналитическая химия". Фотометрические методы анализа/ сост.: Л.А. Латышева, Г.М. Болейко, О.Г. Карманова, В.С.

Талисманов. - М.: МФТИ, 2017, - 22 с.

3. Методические указания к лабораторным работам по курсу "Аналитическая химия".

Титриметрические методы анализа/ сост.: Г.М. Болейко, О.Г. Карманова, В.С. Талисманов. - М.: МФТИ, 2016, - 42 с.

Интернет-технологии в поиске и распространении учебно-научной информации

Цель дисциплины:

Целью является обучение студентов методам определения перспективных направлений научного поиска и информационных источников для аналитического поиска в избранной для специализации предметной области.

Задачи дисциплины:

- освоение студентами базовых знаний в области Web-технологий, Интернет, эргономики, поиска информации, защиты информации, защиты интеллектуальной собственности;
- приобретение теоретических знаний и практических навыков в области анализа Интернет-проектов;
- оказание консультаций и помощи студентам в организации собственных Интернет-проектов, посвященных научно-исследовательской и инновационной деятельности

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основные понятия и термины в теории информации, работе поисковых систем, новостных сайтов, эргономике, защите информации;
- схемы распространения научно-учебной информации;
- основные правовые акты, регулирующие деятельность в Интернет;
- методы защиты интеллектуальной собственности;
- виды конфиденциальной информации, персональных данных, способы их защиты;
- виды правонарушений в Интернет, методы и средства защиты от них.

Уметь:

- эффективно искать литературу и другую специальную информацию в избранной области науки и техники;
- определять цели, аудиторию, позиционирование, бизнес-модель работы Web-проекта;
- создавать новости по избранной тематике;
- составлять семантическое ядро Web-сайта и анализировать его;
- пользоваться специализированными базами данных в избранной области науки;
- проводить патентный поиск;
- создавать и продвигать собственный Интернет-проект.

Владеть:

- навыками сбора, систематизации и анализа научно-технической и другой профессиональной информации;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернет;
- навыками организации совместной работы над Интернет-проектом, управлении коллективом.

К содержанию дисциплины относятся основные разделы курса:

- Введение в курс
- Информационная безопасность
- Конфиденциальная информация
- Общение в Интернет
- Поиск и распространение новостей в Интернет
- Поисковые системы
- Право и Интернет
- Схемы распространения информации
- Схемы создания информации

Основная литература:

1. Колисниченко Д.Н., Поисковые системы и продвижение сайтов в Интернете. – Изд-во «Диалектика», 2007.
2. Ашманов И., Иванов А. и др., Оптимизация и продвижение сайтов в поисковых системах. – Изд-во «Питер», 2011. – 464 с.

История, философия и методология естествознания

Цель дисциплины:

приобщить студентов к историческому опыту мировой философской мысли, дать ясное представление об основных этапах, направлениях и проблемах истории и философии науки, способствовать формированию навыков работы с предельными вопросами, связанными с границами и основаниями различных наук и научной рациональности, овладению принципами рационального философского подхода к процессам и тенденциям развития современной науки.

Задачи дисциплины:

- систематизированное изучение философских и методологических проблем естествознания с учетом историко-философского контекста и современного состояния науки;
- приобретение студентами теоретических представлений о многообразии форм человеческого опыта и знания, природе мышления, соотношении истины и заблуждения;
- понимание роль науки в развитии цивилизации, соотношение науки и техники и связанные с ними современные социальные и этические проблемы, умение различать исторические типы научной рациональности, знать структуру, формы и методы научного познания в их историческом генезисе, современные философские модели научного знания;
- знакомство с основными научными школами, направлениями, концепциями, с ролью новейших информационных технологий в мире современной культуры и в области гуманитарных и естественных наук;
- понимание смысла соотношения биологического и социального в человеке, отношения человека к природе, дискуссий о характере изменений, происходящих с человеком и человечеством на рубеже третьего тысячелетия;
- знание и понимание диалектики формирования личности, ее свободы и ответственности, своеобразие интеллектуального, нравственного и эстетического опыта разных исторических эпох.

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- структуру естественных и социо-гуманитарных наук, специфику их методологического

аппарата;

- соотношение принципов и гипотез в построении научных систем и теорий;
- основы современной научной картины мира, базовые принципы научного познания и ключевые направления междисциплинарных исследований;
- концепции развития науки и разные подходы к проблеме когнитивного статуса научного знания;
- проблему материи и движения;
- понятия энергии и энтропии;
- проблемы пространства–времени;
- современные проблемы физики, химии, математики, биологии, экологии;
- великие научные открытия XX и XXI веков;
- ключевые события истории развития науки с древнейших времён до наших дней;
- взаимосвязь мировоззрения и науки;
- проблему формирования мировоззрения;
- систему интердисциплинарных отношений в науке, проблему редукционизма в науке;
- теоретические модели фундаментальных процессов и явлений в физике и ее приложениях к естественным наукам;
- о Вселенной в целом как физическом объекте и ее эволюции;
- о соотношении порядка и беспорядка в природе, о проблемах нелинейных процессов и самоорганизующихся систем;
- динамические и статистические закономерности в природе;
- о роли вероятностных описаний в научной картине мира;
- принципы симметрии и законы сохранения;
- новейшие открытия естествознания для создания технических устройств;
- особенности биологической формы организации материи, принципы воспроизводства и развития живых систем;
- о биосфере и направлении ее эволюции.

Уметь:

- эффективно использовать на практике теоретические компоненты науки: понятия, суждения, умозаключения, гипотезы, доказательства, законы;
- применять методологию естествознания при организации конкретных исследований;
- дать панораму наиболее универсальных методов и законов современного естествознания.

Владеть:

- научной методологией как исходным принципом познания объективного мира;
- принципами выбора адекватной методологии исследования конкретных научных проблем;
- системным анализом;
- знанием научной картины мира;
- понятийным и методологическим аппаратом междисциплинарных подходов в науке.

К содержанию дисциплины относятся основные разделы курса:

- Возникновение и развитие науки на Западе и на Востоке
- Методология научного и философского познания
- Современная философия о проблемах естественнонаучного знания
- Современная философия о проблемах естественнонаучного знания
- Современная философия о проблемах социального и гуманитарного знания
- Наука, религия, философия
- Проблема кризиса культуры в научном и философском дискурсе
- Наука и философия о природе сознания

Основная литература:

1. Западная философия от истоков до наших дней [Текст] : [в 4 т.] Т. 3. От Возрождения до Канта / С. А. Мальцева, Д. Антисери, Дж. Реале .— СПб. : Пневма, 2004, 2010 .— 880 с.
2. Западная философия от истоков до наших дней [Текст] : [в 4 т.] / Д. Антисери, Дж. Реале ; пер. с итал. под ред. С. А. Мальцевой .— СПб. : Пневма, 2003. — Т. 1-2: Античность и Средневековье. - 2003. - 688 с.
3. Западная философия от истоков до наших дней [Текст] : [в 4 т.] Т. 4 / Д. Антисери, Дж. Реале; пер. с итал. под ред. С. А. Мальцевой .— СПб. : Пневма, 2003, 2008 .— 880 с.
4. Западная философия от истоков до наших дней [Текст]: [в 4 т.] / Д. Антисери, Дж. Реале; пер. с итал. С. А. Мальцевой .— СПб. : Пневма, 2004 .— Т. 3: От Возрождения до Канта. - 2004. - 880 с.
5. Философия [Текст] : Хрестоматия / сост. П. С. Гуревич .— М. : Гардарики, 2002 .— 543 с.
6. Философия науки [Текст] : учебник для магистратуры / под ред. А. И. Липкина ; Моск. физ.-техн. ин-т (гос. ун-т) .— 2-е изд., перераб. и доп. — М. : Юрайт, 2015 .— 512 с

Нанобиофотоника

Цель дисциплины:

- изучение основ современной фотохимии, фотофизики, электронной спектроскопии;
- овладение знаниями о реакционной способности возбужденных состояний молекул, наночастиц, фотоферментов, твердых тел;
- введение в основные классы природных и промышленных фотохимических процессов.

Задачи дисциплины:

- приобретение базовых знаний о природе возбужденных состояний в атомах, молекулах, наночастицах, твердом теле: поглощение и излучение света атомами и молекулами; поверхность потенциальной энергии; поглощение и излучение света полупроводниками, полупроводниковыми наночастицами; взаимодействие света с металлами и металлическими наночастицами, представление о плазмоне-поляритоне.
- освоение студентами базовых знаний о фотофизических процессах в молекулярных системах: фотофизические процессы дезактивации возбужденных состояний; внутримолекулярные и межмолекулярные каналы дезактивации; безизлучательный перенос энергии; эксимер и эксиплекс; процессы фотосенсибилизации.
- освоение студентами базовых знаний о фотохимических процессах: однофотонные и многофотонные процессы; фотоиндуцированный перенос электрона; фотоиндуцированный перенос протона; фотодиссоциация; фотоионизация; фотоизомеризация; перициклические концертные реакции; фотополимеризация; стабилизация и фотодеградация полимеров и пигментов; фотохимические реакции органического синтеза;
- приобретение основных представлений о фотоэлектрохимии полупроводников и полупроводниковых наночастиц, фотокатализе и преобразовании солнечной энергии: фотохимические процессы на границе раздела твердое тело/ твердое тело, твердое тело/электролит; фотоиндуцированное разделение заряда; термодинамика преобразования солнечного света; фотолиз воды; фотовольтаические и фотогальванические ячейки.
- приобретение базовых знаний о природных фотохимических процессах: фотохимия атмосферы; природный фотосинтез.

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- ☒ физические свойства возбужденных состояний в молекулах, наночастицах, твердом теле;
- ☒ основы теорий элементарных фотохимических и фотофизических процессов;
- ☒ о физических принципах фотоэлектрохимии, фотокатализа и преобразования солнечной энергии;
- ☒ основные представления о природных фотохимических процессах - фотохимии атмосферы, природного фотосинтеза и зрении;
- ☒ порядки физических величин, характерных для элементарных процессов фотохимии и фотофизики.

Уметь:

- ☒ абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных молекулярных процессов;
- ☒ делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- ☒ производить численные оценки по порядку величины;
- ☒ делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- ☒ эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

Владеть:

- ☒ навыками освоения большого объема информации;
- ☒ навыками самостоятельной работы в научной библиотеке, лаборатории и интернете;
- ☒ культурой постановки и моделирования физических задач;
- ☒ навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами молекул, электромагнитного излучения и взаимодействия между ними.

К содержанию дисциплины относятся основные разделы курса:

- Взаимодействие света с металлами и металлическими наночастицами, представление о плазмоне-поляритоне
- Взаимодействие света с металлами и металлическими наночастицами, представление о плазмоне-поляритоне II
- Внутримолекулярная дезактивация молекул
- Механизм межмолекулярного переноса энергии
- Поглощение и излучение света атомами и молекулами.

- Поглощение и излучение света полупроводниками, полупроводниковыми наночастицами I.
- Поглощение и излучение света полупроводниками, полупроводниковыми наночастицами II
- Преобразование солнечной энергии I.
- Преобразование солнечной энергии II
- Природный фотосинтез II. Зрение.
- Фотохимические гетеролитические реакции I.
- Фотохимические гетеролитические реакции II.
- Фотохимические гетеролитические реакции III.
- Фотохимические гомолитические реакции I.
- Фотохимические гомолитические реакции II.
- Фотохимия атмосферы. Природный фотосинтез I.
- Фотоэлектрохимия полупроводников и полупроводниковых наночастиц, фотокатализ.

Основная литература:

1. Л. Д. Ландау, Е.М. Лифшиц ; под ред. Л. П.Питаевского.-5-е из-д., стереотип.-М.:Физматлит.Т. 3:Квантовая механика. Нерелятивистская теория.-2004.-808 с.
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под ред. Л.П. Питаевского.-5-е изд., стереотип..-М.:Физматлит.Т. 1:Механика.- 2007.-224 с.
3. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия М.: Мир, Изд-во МГУ, 2001, 519 с. (http://lib.prometey.org/?sub_id=95&page=4) Гл. 1-5.
4. В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997, 558 с. (<http://www.chemport.ru/?cid=33&p=1>) Гл. 1-6.
5. Майер И. Избранные главы квантовой химии М.: БИНОМ, 2006, 384с. Гл. 1, 2.
6. Peter Hamm Principles of Nonlinear Optical Spectroscopy: A Practical Approach. University of Zurich August 26, 2005 <http://www.mitr.p.lodz.pl/evu/lectures/Hamm.pdf>
7. E. C. Le Ru and P. G. Etchegoin, Principles of Surface-Enhanced Raman Spectroscopy and Related Plasmonic Effects (Elsevier, Amsterdam, 2009)

Основы химической физики конденсированного состояния

Цель дисциплины:

- освоение студентами фундаментальных знаний в области химической физики

конденсированного состояния, изучение методов исследования наиболее важных особенностей физико-химических процессов в конденсированной фазе.

Задачи дисциплины:

- формирование базовых знаний в области химической физики конденсированного состояния как дисциплины, интегрирующей общефизическую и общетеоретическую подготовку физиков и обеспечивающей технологические основы современных инновационных сфер деятельности;
- обучение студентов принципам исследования характерных особенностей механизмов физико-химических процессов в конденсированной фазе, выявление особенностей их кинетики, интерпретация результатов исследований с использованием современных теоретических методов;
- формирование подходов к выполнению исследований студентами в области химической физики конденсированного состояния в рамках выпускных работ на степень магистра.

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- ☒ место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;
- ☒ современные проблемы физики, химии, математики;
- ☒ теоретические модели фундаментальных процессов и явлений в физике и ее приложениях;
- ☒ принципы симметрии и законы сохранения;
- ☒ новейшие открытия естествознания;
- ☒ постановку проблем физико-химического моделирования;
- ☒ о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

Уметь:

- ☒ эффективно использовать на практике теоретические компоненты науки: понятия, суждения, умозаключения, законы;
- ☒ представить панораму универсальных методов и законов современного естествознания;
- ☒ работать на современном экспериментальном оборудовании;
- ☒ абстрагироваться от несущественных влияний при моделировании реальных физических ситуаций;
- ☒ планировать оптимальное проведение эксперимента.

Владеть:

- ☑ планированием, постановкой и обработкой результатов физического эксперимента;
- ☑ научной картиной мира;
- ☑ навыками самостоятельной работы в лаборатории на современном экспериментальном оборудовании;
- ☑ математическим моделированием физических задач.

К содержанию дисциплины относятся основные разделы курса:

- Активационные стохастические процессы
- Квантовые эффекты в физико-химических процессах
- Кинетика диффузионно контролируемых реакций. Геминальные и объемные процессы
- Кинетика реакций переноса заряда в полярных средах
- Кинетические свойства конденсированных сред
- Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях в конденсированной фазе
- Примеры активационных процессов: переходы в двухамных системах (стохастический резонанс), броуновские моторы, и т.д.
- Процессы в неупорядоченных средах. Аномальные кинетики реакций в конденсированной фазе
- Структура твердых тел и жидкостей. Упорядоченные и неупорядоченные состояния
- Эффект потенциала взаимодействия. Кинетика реакций при наличии клетки
- Эффект стерических факторов. Кинетика реакций анизотропных молекул

Основная литература:

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.-М.:Физматлит. Т. 9:Статистическая физика: в 2 ч. Ч. 2. Теория конденсированного состояния /Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский.- 2005.-496 с.
2. Энтелис С.Г., Тигер Р.П. Кинетика реакций в жидкой фазе. М. : Химия, 1973, 416 с.

Семинар по химической физике

Цель дисциплины:

- семинар предназначен для развития у студентов способности квалифицированно ориентироваться в современной научной литературе, а также внятно и аргументировано излагать

свои соображения по научным вопросам. В этом смысле семинар является первым шагом реальной профессиональной ориентации будущих научных работников в области экспериментальной и теоретической физики.

Задачи дисциплины:

- сформировать у студентов навыки работы с научной литературой, ознакомить студентов с современными научными исследованиями в области химической физики.

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- наименования основных периодических отечественных и зарубежных научных изданий, в которых публикуются результаты исследований по химической физике;
- основные реферативные журналы и поисковые системы;
- современные научные проблемы по тематике дисциплины.

Уметь:

- находить научные статьи по заданной тематике;
- пользоваться реферативными журналами и поисковыми системами;
- составлять литературные обзоры;
- делать доклады по литературному обзору;
- оформлять тезисы конференций, научные статьи;
- рецензировать статьи, тезисы, авторефераты;
- воспринимать научный доклад и анализировать его;
- задавать вопросы по научным докладам.

Владеть:

- приемами поиска научной информации;
- приемами изложения в письменном и устном видах результатов научных исследований.

К содержанию дисциплины относятся основные разделы курса:

- Семинар по химической физике
- Семинар по химической физике

Основная литература:

Список журналов, обязательных к изучению:

1. J. of Chemical Physics
2. J. of Physical Chemistry C
3. Sensors and Actuators B: Chemical
4. Chemical Physics Letters
5. J. of Physical Chemical Letters
6. Ж. физической химии
7. Химическая физика.

Теория элементарных химических реакций

Цель дисциплины:

- изучение основных физических представлений о механизмах элементарных химических реакций.

Задачи дисциплины:

- освоение студентами базовых знаний в области теории элементарных химических реакций;
- оказание консультаций и помощи студентам в проведении собственных теоретических и экспериментальных исследований в области химической кинетики и фемтохимии.

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- ☐ основные представления теории элементарных химических реакций;
- ☐ порядки численных величин, характерные для элементарных химических реакций.

Уметь:

- ☐ абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных химических процессов;
- ☐ делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- ☐ производить численные оценки по порядку величины;
- ☐ делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;

☑ эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

Владеть:

☑ навыками освоения большого объема информации;

☑ навыками самостоятельной работы в лаборатории;

☑ культурой постановки и моделирования физических задач;

☑ навыками теоретического анализа реальных задач, связанных с элементарными химическими превращениями.

К содержанию дисциплины относятся основные разделы курса:

- Важнейшие характеристики поверхностей потенциальной энергии
- Метод переходного состояния для расчета констант скорости прямых термических бимолекулярных реакций.
- Проблема происхождения потенциального барьера в химических реакциях.
- Статистическая теория бимолекулярных реакций, идущих через долгоживущий промежуточный комплекс.
- Уравнение Шредингера для системы электронов и ядер – теоретическая основа для описания химической реакции.
- Характеристики элементарных бимолекулярных реакций: сечения и константы скорости. Экспериментальные данные о термических химических реакциях.
- Химическая реакция в газе - проявление элементарного акта химического превращения в наиболее чистом виде. Классификация газофазных реакций.

Основная литература:

1. С.Я.Уманский Теория элементарных химических реакций. Долгопрудный, Интеллект, 2009.
2. Е.Е.Никитин Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах. М., Химия, 1970.
3. В.Н.Кондратьев, Е.Е.Никитин Химические процессы в газах. М., Наука, 1981.
4. В.Н.Кондратьев, Е.Е.Никитин, А.И.Резников, С.Я.Уманский Термические бимолекулярные процессы в газах. М. , Наука, 1976.
5. Г.Эйринг, С.Г.Лин, С.М.Лин Основы химической кинетики. М., Мир, 1983.
6. С. Глессон, К.Лейдлер, Г.Эйринг Теория абсолютных скоростей реакций. М., ИЛ, 1948.
7. И.А.Семиохин, В.В.Страхов, А.И.Осипов Кинетика химических реакций. М. Изд-во МГУ, 1995.

8. Э.А.Мелвин-Хьюз Физическая химия, т. I, II. М., ИЛ, 1962.
9. П.Робинсон, К.Холбрук Мономолекулярные реакции. М., Мир, 1975.
10. Н.М.Кузнецов Кинетика мономолекулярных реакций. М., Наука, 1982.

Химическая физика твердого состояния вещества

Цель дисциплины:

– освоение студентами фундаментальных знаний о строении и свойствах реальных кристаллов и стекол, начиная от энергии кристаллического поля, дефектной структуры реального твердого тела и многообразия форм теплового движения до ответной реакции твердых тел на интенсивные физические воздействия.

Задачи дисциплины:

- формирование базовых знаний в области химической физики реального твердого тела как дисциплины, интегрирующей общефизическую и общетеоретическую подготовку физиков и обеспечивающей технологические основы современных инновационных сфер деятельности;
- обучение студентов принципам учета дефектной структуры твердого тела, выявление роли дефектов различной природы и их влияния на различные физические и химические свойства реальных материалов;
- формирование подходов к выполнению исследований студентами в области химической физики в рамках выпускных работ на степень магистра.

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- ☑ основные представления о кристаллической решетке и реальной дефектной структуре твердого тела, особенностях аморфного и наносостояния, о природе химической связи в твердом теле;
- ☑ основные представления о физической природе различных свойств твердого тела и определяющем влиянии на них различных факторов (кристаллическая решетка, дефекты,

наносостояние, природа химической связи и пр.);

☒ особенности подвижности и реакционной способности в твердом состоянии, способы влияния на эти величины;

☒ порядки численных величин, характерных для различных свойств твердого состояния вещества.

Уметь:

☒ выделять наиболее существенные физические факторы, влияющие на те или иные свойства;

☒ делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;

☒ производить численные оценки по порядку величины;

☒ делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;

☒ эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

Владеть:

☒ навыками освоения большого объема информации;

☒ навыками самостоятельной работы в лаборатории;

☒ культурой постановки и моделирования физических задач;

☒ навыками планирования, постановкой и обработкой результатов физического эксперимента в области химической физики твердого состояния.

К содержанию дисциплины относятся основные разделы курса:

- Введение
- Внутренняя энергия кристаллов.
- Деформации и напряжение в твердых телах.
- Иерархия структурных дефектов в кристаллах.
- Тепловое движение в твердых телах.
- Аморфные твердые тела (стекла).
- Диффузия в твердых телах
- Заключение по курсу.
- Нанокристаллы
- Особенности кинетики химических реакций в твердых телах.
- Твердые тела при интенсивных физических воздействиях.

Основная литература:

1. А.Н. Орлов. Введение в теорию дефектов в кристаллах. М., Высш. школа, 1983.

2. Дж.Хирт,И.Лотт е. Теория дислокаций. М., Атомиздат, 1972.
3. Я.Е.Гегузин. Физика спекания. М., Наука, 1984.
4. А.А. Чернов и др. Современная кристаллография, т.1-3. М., Наука, 3-х-томная коллективная монография. 1980.
5. Э.Д. Алукер и др. Быстропротекающие ради ационно-стимулированные процессы в щелочно-галоидных кристаллах. Рига, Зинатне, 1987.
6. В.С.Бокштейн, С.З. Бокштейн, А.А Жуковицкий. Термодинамика и кинетика диффузии в твердых телах. М., Металлургия, 1974 .
7. Ю.Д. Третьяков. Химия твердого тела. М. МГУ, 2002.
8. Дэвинсон, Дж. Левин. Поверхностные (таммовские) электронные состояния. М., Мир, 1973.
9. И.П.Суздаев. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. 2005

Экспериментальные методы химической физики полимеров и композиционных материалов

Цель дисциплины:

- 1) изучение основ современных экспериментальных методов химической физики;
- 2) овладение знаниями о применимости современных структурных, спектроскопических и микроскопических методов;
- 3) введение в основы методов молекулярного моделирования.

Задачи дисциплины:

- приобретение базовых знаний о дифракционных, спектроскопических, электрофизических, реологических методах исследования;
- приобретение основных представлений о молекулярном моделировании: понятие статистического ансамбля, методе молекулярной динамики, организации молекулярно-динамических экспериментов и анализе результатов моделирования;
- получение навыков моделирования сложных полимерных систем, моделирования в дискретном пространстве (на решетках и сетках), моделирования полимерных стекол и сложных биологических молекул, растворов металлов, солей, полиэлектролитов, нано-частиц и нанокомпозитов;

- освоение стандартных комплексов программ для проведения молекулярно-динамических расчетов (Hyperchem, GROMACS, AMBER, PUMA).

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- ☑ физические основы рентгеновских, спектроскопических, термических, реологических, электрофизических методов исследования;
- ☑ скейлинговый подход к описанию морфологии поверхности;
- ☑ об основных методах молекулярной механики и молекулярной динамики;
- ☑ основные представления о природных фотохимических процессах - фотохимии атмосферы, природного фотосинтеза и зрения.
- ☑ статистический анализ термодинамических ансамблей: определение термодинамических средних в различных ансамблях, флуктуации термодинамических величин, структура молекулярных систем, временные корреляционные функции и транспортные коэффициенты.

Уметь:

- ☑ абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных молекулярных процессов;
- ☑ делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- ☑ производить численные оценки по порядку величины;
- ☑ делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- ☑ анализировать экспериментальные данные рентгеновского, спектроскопического, термического, реологического эксперимента;
- ☑ проводить молекулярное моделирование в современных комплексах для проведения молекулярно-динамических расчетов (Hyperchem, GROMACS, AMBER, PUMA).
- ☑ проводить обработку данных численного эксперимента: различные источники ошибок в численном моделировании, ошибки измерения термодинамических и структурных величин, коррекция результатов при учете обрезания потенциала взаимодействия;
- ☑ эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

Владеть:

- ☑ навыками освоения большого объема информации;

- ☑ навыками самостоятельной работы в научной библиотеке, лаборатории и интернете;
- ☑ культурой постановки и моделирования физико-химических задач;
- ☑ навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами молекул, электромагнитного излучения и взаимодействия между ними;
- ☑ навыками молекулярного моделирования сложных полимерных и биологических систем.

К содержанию дисциплины относятся основные разделы курса:

- Анализ молекулярной структуры в численных экспериментах. Неравновесная молекулярная динамика
- Зондовая микроскопия. Скейлинговые подходы описания морфологии поверхности
- Колебательная спектроскопия: инфракрасная спектроскопия, рамановское рассеяние
- Малоугловое рентгеновское и нейтронное рассеяние
- Метод молекулярной динамики. Организация молекулярно-динамических экспериментов. Анализ результатов моделирования.
- Методы броуновской и столкновительной динамики. Моделирование полимерных стекол
- Методы молекулярной механики. Моделирование сложных полимерных систем
- Модели роста тонких пленок
- Молекулярные модели. Статистические ансамбли.
- Основы кристаллографии
- Рентгеновская дифракция
- Светорассеяние, определение массы рассеивающей единицы и размеров молекул
- Стандартные комплексы программ для проведения молекулярно-динамических расчетов. Практические занятия
- Термический анализ, ДТА, ДСК, ТГА, ТМА, ДМА
- Численные эксперименты на различных молекулярных системах. Моделирование биологических молекул
- Электрофизические испытания, реологические исследования

Основная литература:

1. Де Жен П.Г. Теория скейлинга в полимерной физике. Мир. 1998. 450 с.
2. Л. Д. Ландау, Е.М. Лифшиц ; под ред. Л. П. Питаевского.-5-е изд., стереотип.-М.:Физматлит.Т.5:Статистическая физика. Ч. 1.- 2010.-616 с.
3. И.В. Лихачев, Н.К. Балабаев. Анализатор траекторий молекулярной динамики. Мате-матическая биология и биоинформатика, 2007, том 2, №1, с.120-129, [http://www.matbio.org/downloads/Likhachev2007\(2_120\).pdf](http://www.matbio.org/downloads/Likhachev2007(2_120).pdf)
4. Метод молекулярной динамики в физической химии. Отв. ред. Ю.К.Товбин. М.: Наука, 1996.

334 с.

5. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990, 175 с.