

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(государственный университет)»**



**«УТВЕРЖДАЮ»**

**Проректор по учебной работе  
и экономическому развитию**

\_\_\_\_\_ **Д.А. Зубцов**

**по дисциплине:** Рабочая программа дисциплины (модуля) Экспериментальные методы химической физики  
**по направлению:** Прикладные математика и физика (магистратура)  
**профиль подготовки:** Химическая физика  
Факультет молекулярной и химической физики  
кафедра химической физики  
**курс:** 1  
**квалификация:** магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2(Весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

практические и семинарские занятия: 30 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 30 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

**Программу составил:** С.Н. Чвалун, д-р хим. наук, профессор

**Программа обсуждена на заседании кафедры**

16 февраля 2016 г.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий кафедрой

А.А. Берлин

Начальник учебного управления

И.Р. Гарайшина

Декан факультета

В.М. Некипелов

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

Целью курса является:

- 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

Задачами данного курса являются:

- приобретение базовых знаний о дифракционных, спектроскопических, электрофизических, реологических методах исследования;
- приобретение основных представлений о молекулярном моделировании: понятии 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 нанокompозитов;
- освоение стандартных комплексов программ для проведения молекулярно-динамических расчетов (Hyperchem, GROMACS, AMBER, PUMA).

## 2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Данная дисциплина относится к вариативной части образовательной программы.

Дисциплина «Экспериментальные методы химической физики» базируется на дисциплинах:

- Общая и неорганическая химия;
- Физические методы исследований;
- Физические методы исследований: лабораторный практикум;
- Введение в математический анализ;
- Вычислительная математика;
- Дифференциальные уравнения;
- Линейная алгебра;
- Основы химической физики;
- Теория вероятностей;
- Теория функций комплексного переменного;
- Уравнения математической физики;
- Общая физика: лабораторный практикум;
- Общая физика: термодинамика и молекулярная физика;
- Общая физика: оптика;
- Аналитическая геометрия;
- Основы химической физики: лабораторный практикум;
- Кратные интегралы и теория поля;
- Общая физика: механика;
- Общая физика: электричество и магнетизм;
- Многомерный анализ, интегралы и ряды;
- Гармонический анализ;
- Общая физика: квантовая физика.

Дисциплина «Экспериментальные методы химической физики» предшествует изучению дисциплин:  
Научно-исследовательская работа.

### **3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций:

- способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);
- способность выбирать цели своей деятельности и пути их достижения, прогнозировать последствия научной, производственной и социальной деятельности (ОПК-4);
- способность самостоятельно и (или) в составе исследовательской группы разрабатывать, исследовать и применять математические модели для качественного и количественного описания явлений и процессов и (или) разработки новых технических средств (ПК-1);
- способность ставить, формализовать и решать задачи, уметь системно анализировать научные проблемы, генерировать новые идеи и создавать новое знание (ПК-2).

#### **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.

**4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

**4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий**

№	Тема (раздел) дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу				
		Лекции	Практические и семинарские занятия	Лаборат. работы	Задания, курсовые работы	Самост. работа
1	Анализ молекулярной структуры в численных экспериментах. Неравновесная молекулярная динамика		2			
2	Зондовая микроскопия. Скейлинговые подходы описания морфологии поверхности		2			
3	Колебательная спектроскопия: инфракрасная спектроскопия, рамановское рассеяние		2			
4	Малоугловое рентгеновское и нейтронное рассеяние		2			
5	Метод молекулярной динамики. Организация молекулярно-динамических экспериментов. Анализ результатов моделирования.		2			
6	Методы броуновской и столкновительной динамики. Моделирование полимерных стекол		2			
7	Методы молекулярной механики. Моделирование сложных полимерных систем		2			
8	Модели роста тонких пленок		2			
9	Молекулярные модели. Статистические ансамбли.		2			
10	Основы кристаллографии		2			
11	Рентгеновская дифракция		2			
12	Светорассеяние, определение массы рассеивающей единицы и размеров молекул		2			30
13	Стандартные комплексы программ для проведения молекулярно-динамических расчетов. Практические занятия		2			
14	Термический анализ, ДТА, ДСК, ТГА, ТМА, ДМА		1			
15	Численные эксперименты на различных молекулярных системах. Моделирование биологических молекул		1			

16	Электрофизические испытания, реологические исследования		2			
Итого часов			30			30
Подготовка к экзамену		30 час.				
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.				

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

##### Семестр: 2 (Весенний)

1. Анализ молекулярной структуры в численных экспериментах. Неравновесная молекулярная динамика

Анализ аморфных и кристаллических структур. Структуры жидкостей. Многогранники Вороного и симплексы Делонэ. Моделирование механического сдвига. Использование градиента температуры. Диффузия. Структурная релаксация.

2. Зондовая микроскопия. Скейлинговые подходы описания морфологии поверхности

Контактный, полуконтактный и бесконтактный режимы сканирования. Модели взаимодействия зонда и поверхности. Измерение локальных механических свойств поверхности. Электростатическая силовая микроскопия, Кельвин-зондовая силовая микроскопия, магнитно-силовая спектроскопия. Параметризация случайно-шероховатых поверхностей. Самоаффинные поверхности. Определение скейлинговых коэффициентов.

3. Колебательная спектроскопия: инфракрасная спектроскопия, рамановское рассеяние

Инфракрасное излучение и колебания молекул. Гармонические и ангармонические колебания. Колебания многоатомных молекул. Характеристичные колебательные частоты органических соединений. Интерпретация инфракрасных спектров. Классическая и квантовая теория комбинационного рассеяния. Эмпирические законы комбинационного рассеяния.

4. Малоугловое рентгеновское и нейтронное рассеяние

Интенсивность как функция Фурье электронной плотности. Асимптотики Гинье и Порода. Функция парных корреляций. Расчет основных структурных параметров рассеивающей системы: размеры и масса частиц, объем, площадь и фрактальная размерность поверхности. Метод вариации контраста плотности рассеяния.

5. Метод молекулярной динамики. Организация молекулярно-динамических экспериментов. Анализ результатов моделирования.

Уравнения движения для атомных систем. Алгоритмы численного интегрирования траекторий (алгоритмы Верле, метод Рунге-Кутты). Расчет траекторий для молекул с жесткими связями. Моделирование систем с потенциалами твердых сфер. Вычисление сил, энергии и давления. Моделирование малых систем. Периодические граничные условия. Способы задания потенциалов взаимодействия. Расчеты с дальнедействующими потенциалами. Задание начальных координат и скоростей атомов. Общая структура программы. Вывод и обработка результатов.

## 6. Методы броуновской и столкновительной динамики. Моделирование полимерных стекол

Физические основы и численные методы. Возможности и ограничения. Моделирование в дискретном пространстве (на решетках и сетках). Моделирование полимерных систем. Анализ транс-гош переходов в расплавах полимеров. Получение начальных данных при моделировании стекол. Анализ неупорядоченной структуры. Локальные характеристики механического напряжения и смещения.

## 7. Методы молекулярной механики. Моделирование сложных полимерных систем

Методы градиентного спуска. Молекулярная механика и молекулярная динамика. Расплавы олигомеров и полимеров. Монослои из цепочечных молекул. Внутримолекулярная подвижность и структура сложных биологических молекул. Моделирование полимерных кристаллов. Дефекты в полимерных кристаллах и их влияние на молекулярную подвижность.

## 8. Модели роста тонких пленок

Механизмы роста тонких пленок из газовой фазы. Механизм островкового роста (модель Фольмера-Вербера), механизм послойного роста (модель Франка - Ван дер Мерве), модель Странского-Крастанова. Гомогенное и гетерогенное зародышеобразование. Рост изолированных островков. Рост островков в ансамбле (решеточное приближение, приближение равномерного обеднения). Функции распределения островков по размерам при разных механизмах их формирования.

## 9. Молекулярные модели. Статистические ансамбли.

Геометрия молекул и атом-атомные потенциалы. Межмолекулярные взаимодействия. Построение модельных потенциалов. Наиболее распространенные системы потенциалов. Особенности модельных потенциалов для металлов и воды. Молекулярные модели полимеров. Понятие статистического ансамбля. Основные статистические ансамбли. Определение термодинамических средних в различных ансамблях. Структура молекулярных систем. Временные корреляционные функции и транспортные коэффициенты.

## 10. Основы кристаллографии

Принцип плотной упаковки. Волновой вектор и сфера Эвальда, понятие обратного пространства. Элементы симметрии. Решетки Бравэ. Точечные группы. Федоровские группы симметрии.

## 11. Рентгеновская дифракция

Рассеяние гамма-кванта на одиночном атоме. Индексы Миллера. Уравнение Брэгга-Вульфа. Уравнение Селякова-Шерера. Факторы уширения кристаллографических рефлексов. Паракристалличность.

## 12. Светорассеяние, определение массы рассеивающей единицы и размеров молекул

Статическое и динамическое рассеяние света, второй вириальный коэффициент, молекулярно-массовое распределение. Координаты Гинье, Дебая, Зима.

## 13. Стандартные комплексы программ для проведения молекулярно-динамических расчетов. Практические занятия

Hyperchem, GROMACS,

AMBER, PUMA. Использование программ Hyperchem и PUMA. Визуализация результатов численного моделирования.

#### 14. Термический анализ, ДТА, ДСК, ТГА, ТМА, ДМА

Схемы работы приборов ДТА и ДСК, их отличия. Фазовые переходы первого и второго рода в полимерах. Определение температуры стеклования методами ДТА и ДСК. Определение термодинамических параметров полимеризации. Определение термостойкости, температуры и кинетических параметров деструкции полимеров. Определение температуры стеклования, текучести, температуры размягчения, коэффициента термического расширения. Время релаксации, релаксационные переходы.

#### 15. Численные эксперименты на различных молекулярных системах. Моделирование биологических молекул

Растворы металлов. Растворы солей. Полиэлектролиты. Малые системы. Наночастицы и наноконпозиты. Моделирование белков, ДНК, биологических мембран.

#### 16. Электрофизические испытания, реологические исследования

Электрическая прочность. Поверхностное удельное сопротивление. Объемное удельное сопротивление. Коэффициент рассеяния. Вязкоэластичность полимеров. Модели вязкости. Кривые течения. Сдвиговое утоньшение при течении. Нулевая сдвиговая вязкость полимеров. Осцилляционные тесты. Гели и дисперсии.

### **5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Учебная аудитория, мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система).

### **6. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

#### 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.

#### Дополнительная литература

1. Metropolis N. et al. J. Chem. Phys. 1953. V.21, p. 1087-1092
2. Alder B.J., Wainwright T. J. Chem. Phys. 1957. V.27, p. 1208-1209
3. Allen M.P., Tildesley D.J. "Computer Simulation of Liquids" Oxford: Clarendon, 2001. 385 с.
4. Abraham F.F. "Computational statistical mechanics Methodology, applications and super-computing" Advances in Physics 1986. V.35, № 1, с. 1-111
5. Computer simulation of polymers. Ed. R.J.Roe. L.: Prentice-Hall Inc., 1991
6. Шайтан К.В., Сарайкин С.С., Молекулярная динамика, 1999  
<http://www.moldyn.ru/library/md/default.htm> .
7. А.С. Фёдоров, П.Б. Сорокин, П.В. Аврамов, С.Г. Овчинников. Моделирование свойств, электронной структуры ряда углеродных и неуглеродных нанокластеров и их взаимодействия с легкими элементами. Научное электронное издание, Новосибирск, Издательство СО РАН, 2006. <http://www.kirensky.ru/master/articles/monogr/Book/>
8. W.J. Briels. Theory of Polymer Dynamics. 1998  
<http://cbp.tnw.utwente.nl/PolymeerDictaat/polymerdynamics.html>
9. E.A. Zubova, N.K. Balabaev, L.I. Manevitch. Molecular mechanisms of the chain diffusion between crystalline and amorphous fractions in polyethylene. Polymer, 48 (6), 1802-1813, 2007
10. Метод Монте - Карло в статистической физике. / под ред. К.М. Биндера. М. : Мир. 1982. 400 с.
11. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макромолекул. М. 1989. 341 с.
12. Готлиб Ю.Я., Даринский А.А., Светлов Ю.Е. "Физическая кинетика макромолекул. Л., Химия, 1986. 272 с.
13. Дашевский В.Г. Конформационный анализ органических молекул. М: Химия, 1982. 296 с.
14. Дашевский В.Г. Конформационный анализ макромолекул. М: Наука, 1987. 285 с.
15. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982. 312 с.
16. Крокстон К. "Физика жидкого состояния", М., Мир, 1978
17. Олдер Б., Хувер У. "Численные методы в статистической механике" в кн.: "Физика простых жидкостей. Статистическая теория" М., Мир, 1971, с. 81-115
18. Халатур П.Г. и др. "Машинное моделирование плотных полимерных систем". Успехи химии 1986, т.55, № 4, с. 679-709

## 7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.



## **8. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по итогам обучения**

Приложение

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ  
ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

**по направлению:** Прикладные математика и физика (магистратура)  
**профиль подготовки:** Химическая физика  
Факультет молекулярной и химической физики  
кафедра химической физики  
**курс:** 1  
**квалификация:** магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2(Весенний) - Экзамен

**Разработчик:** С.Н. Чвалун, д-р хим. наук, профессор

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Освоение дисциплины направлено на формирование у обучающегося следующих общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);

способность выбирать цели своей деятельности и пути их достижения, прогнозировать последствия научной, производственной и социальной деятельности (ОПК-4);

способность самостоятельно и (или) в составе исследовательской группы разрабатывать, исследовать и применять математические модели для качественного и количественного описания явлений и процессов и (или) разработки новых технических средств (ПК-1);

способность ставить, формализовать и решать задачи, уметь системно анализировать научные проблемы, генерировать новые идеи и создавать новое знание (ПК-2).

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Экспериментальные методы химической физики» обучающийся должен:

### 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.

### 3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

Перечень контрольных вопросов для сдачи экзамена:

- 1) Статическое и динамическое рассеяние света.
- 2) Второй вириальный коэффициент.
- 3) Молекулярно-массовое распределение.
- 4) Определение массы рассеивающей единицы (формула Рэлея).
- 5) Координаты Гинье.
- 6) Координаты Дебая.
- 7) Координаты Зима.
- 8) Принцип плотной упаковки.
- 9) Волновой вектор.
- 10) Обратное пространство.
- 11) Сфера Эвальда.
- 12) Элементы симметрии.
- 13) Решетки Бравэ.
- 14) Точечные группы симметрии.
- 15) Федоровские группы симметрии.
- 16) Рассеяние гамма-кванта на одиночном атоме.
- 17) Индексы Миллера.
- 18) Уравнение Брэгга-Вульфа.
- 19) Уравнение Селякова- Шерера.
- 20) Факторы уширения кристаллографических рефлексов.
- 21) Паракристалличность.
- 22) Метод вариации контраста плотности рассеяния.
- 23) Интенсивность как функция Фурье электронной плотности.
- 24) Функция парных корреляций.
- 25) Расчет основных структурных параметров рассеивающей системы: размеры и масса частиц, объем, площадь и фрактальная размерность поверхности.
- 26) Схемы работы приборов ДТА и ДСК, их отличия.
- 27) Фазовые переходы первого и второго рода в полимерах.
- 28) Определение температуры стеклования методами ДТА и ДСК.
- 29) Определение термодинамических параметров полимеризации.
- 30) ТГА: основы метода, определение термостойкости, температуры и кинетических параметров деструкции полимеров.
- 31) ТМА: принцип метода, определение температуры стеклования, текучести, температуры размягчения, коэффициента термического расширения.
- 32) ДМА: основы метода, определение вязкоупругих свойств полимеров, времен релаксации, релаксационные переходы.
- 33) Инфракрасное излучение и колебания молекул.
- 34) Гармонические и ангармонические колебания.
- 35) Колебания многоатомных молекул.
- 36) Характеристичные колебательные частоты органических соединений.
- 37) Интерпретация инфракрасных спектров.
- 38) Классическая и квантовая теория комбинационного рассеяния.
- 39) Эмпирические законы комбинационного рассеяния.
- 40) Электрическая прочность.
- 41) Поверхностное и объемное удельное сопротивление.

- 42) Коэффициент рассеяния.
- 43) Вязкоэластичность полимеров.
- 44) Модели вязкости.
- 45) Кривые течения.
- 46) Сдвиговое утоньшение при течении.
- 47) Нулевая сдвиговая вязкость полимеров.
- 48) Осцилляционные тесты.
- 49) Основные принципы сканирующей зондовой микроскопии. Контактный, полуконтактный и бесконтактный режимы сканирования.
- 50) Модели взаимодействия зонда и поверхности. Измерение локальных механических свойств поверхности.
- 51) Силовая спектроскопия.
- 52) Электростатическая силовая микроскопия.
- 53) Кельвин-зондовая силовая микроскопия.
- 54) Магнитно-силовая спектроскопия.
- 55) Подготовка образцов для сканирующей зондовой микроскопии.
- 56) Параметризация случайно-шероховатых поверхностей.
- 57) Самоаффинные поверхности.
- 58) Экспериментальные (прямые и дифракционные) методы определения скейлинговых коэффициентов, характеризующих структуру поверхности.
- 59) Континуальные и атомистические скейлинговые модели роста тонких пленок в неравновесных условиях.
- 60) Механизмы роста тонких пленок из газовой фазы.
- 61) Механизм островкового роста (модель Фольмера-Вербера).
- 62) Механизм послыоного роста (модель Франка - Ван дер Мерве).
- 63) Модель Странского-Крастанова.
- 64) Гомогенное и гетерогенное зародышеобразование, модели зародышеобразования.
- 65) Рост изолированных островков.
- 66) Рост островков в ансамбле (решеточное приближение, приближение равномерного обеднения).
- 67) Функции распределения островков по размерам при разных механизмах их формирования.
- 68) Скейлинговые модели роста пленок в неравновесных условиях.
- 69) Геометрия молекул и атом-атомные потенциалы.
- 70) Межмолекулярные взаимодействия. Построение модельных потенциалов.
- 71) Наиболее распространенные системы потенциалов.
- 72) Особенности модельных потенциалов для металлов и воды.
- 73) Молекулярные модели полимеров.
- 74) Понятие статистического ансамбля. Основные статистические ансамбли.
- 75) Определение термодинамических средних в различных ансамблях.
- 76) Структура молекулярных систем.
- 77) Временные корреляционные функции и транспортные коэффициенты.
- 78) Уравнения движения для атомных систем.
- 79) Алгоритмы численного интегрирования траекторий (алгоритмы Верле, метод Рунге-Кутты).
- 80) Расчет траекторий для молекул с жесткими связями (фиксированные валентные длины и/или углы).
- 81) Моделирование систем с потенциалами твердых сфер.
- 82) Вычисление сил, энергии и давления. Моделирование малых систем.
- 83) Периодические граничные условия.
- 84) Способы задания потенциалов взаимодействия.
- 85) Расчеты с дальнедействующими потенциалами.
- 86) Задание начальных координат и скоростей атомов.

- 87) Различные источники ошибок в численном моделировании.
- 88) Ошибки измерения термодинамических и структурных величин.
- 89) Коррекция результатов при учете обрезания потенциала взаимодействия.
- 90) Методы градиентного спуска.
- 91) Молекулярная механика и молекулярная динамика.
- 92) Примеры использования молекулярной механики.
- 93) Внутримолекулярная подвижность и структура сложных биологических молекул.
- 94) Моделирование полимерных кристаллов.
- 95) Дефекты в полимерных кристаллах и их влияние на молекулярную подвижность.
- 96) Численный анализ неупорядоченных структур.
- 97) Локальные характеристики механического напряжения и смещения.
- 98) Многогранники Вороного и симплексы Делонэ.
- 99) Моделирование механического сдвига. Использование градиента температуры. Диффузия. Структурная релаксация.

#### 4. Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 бал - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

#### **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.