

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

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы  
электроники, фотоники и  
молекулярной физики**

**В.В. Иванов**

**Рабочая программа дисциплины (модуля)**

<b>по дисциплине:</b>	Экспериментальные методы химической физики полимеров и композиционных материалов
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики
<b>курс:</b>	1
<b>квалификация:</b>	магистр

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

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 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 химической физики 29.05.2020

## Аннотация

Курс "Экспериментальные методы химической физики полимеров и композиционных материалов" предусматривает:

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

По результатам освоения курса студент 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:

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 теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами молекул, электромагнитного излучения и взаимодействия между ними;

навыками молекулярного моделирования сложных полимерных и биологических систем.

Темы и разделы:

1. Анализ молекулярной структуры в численных экспериментах. Неравновесная молекулярная динамика
2. Зондовая микроскопия. Скейлинговые подходы описания морфологии поверхности
3. Колебательная спектроскопия: инфракрасная спектроскопия, рамановское рассеяние
4. Малоугловое рентгеновское и нейтронное рассеяние

5. Метод молекулярной динамики. Организация молекулярно-динамических экспериментов. Анализ результатов моделирования.
6. Методы броуновской и столкновительной динамики. Моделирование полимерных стекол
7. Методы молекулярной механики. Моделирование сложных полимерных систем
8. Модели роста тонких пленок
9. Молекулярные модели. Статистические ансамбли.
10. Основы кристаллографии
11. Рентгеновская дифракция
12. Светорассеяние, определение массы рассеивающей единицы и размеров молекул
13. Стандартные комплексы программ для проведения молекулярно-динамических расчетов. Практические занятия
14. Термический анализ, ДТА, ДСК, ТГА, ТМА, ДМА
15. Численные эксперименты на различных молекулярных системах. Моделирование биологических молекул
16. Электрофизические испытания, реологические исследования

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

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

### Задачи дисциплины

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

## 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

## 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

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 зрении;  
 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	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. 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 наноккомпозиты. 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, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

### 6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Химическая физика твердого тела [Текст] : учебник для вузов по направлению "Химия, физика и механика материалов" / П. Ю. Бутягин .— М. : Изд-во МГУ, 2006 .— 272 с.
2. Статистическая термодинамика в физической химии [Текст] : учеб. пособие для вузов / В. Д. Ягдовский .— 2-е изд., испр. и доп. — М. : БИНОМ. Лаб. знаний, 2005 .— 495 с.
3. Молекулярная физика и термодинамика в вопросах и задачах [Текст] : учеб. пособие для вузов / Г. А. Миронова, Н. Н. Брандт, А. М. Салецкий .— М. : Физический фак. МГУ, 2010 .— 600 с.

#### Дополнительная литература

1. Молекулярная физика и термодинамика. Основные положения и решение задач [Текст] : учеб. пособие для вузов / П. Ф. Коротков ; М-во образования РФ , Моск. физико-техн. ин-т (гос. ун-т) .— 2-е изд. — М. : Изд-во МФТИ, 2001, 2004 .— 168 с.
2. Полимерные нанокompозиты [Текст] : учебно-метод. комплекс для подготовки магистров по темат. направлению деятельности нац. нанотехнолог. сети "Композитные наноматериалы" / С.-Петерб. гос. ун-т .— СПб. : Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2011 .— 137 с.
3. Общий курс физики [Текст] : в 5 т. Т. 2 : Термодинамика и молекулярная физика : учеб. пособие для вузов / Д. В. Сивухин .— 5-е изд., испр. — М. : Физматлит, 2005, 2006, 2011, 2014 .— 544 с.

#### **7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

Не используются

#### **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

не предусмотрены.

#### **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

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 к преподавателю.

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



**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)**

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики
<b>курс:</b>	<u>1</u>
<b>квалификация:</b>	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен	
<b>Разработчик:</b>	С.Н. Чвалун, д-р хим. наук, профессор

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Экспериментальные методы химической физики полимеров и композиционных материалов» 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 (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия.

#### 4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы к экзамену:

- 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 послойного 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.

Примеры билетов.

Пример 1.

- 1. Вязкоэластичность полимеров.
- 2. Внутримолекулярная подвижность и структура сложных биологических молекул.

Пример 2.

- 1. Периодические граничные условия.
- 2. Классическая и квантовая теория комбинационного рассеяния.

#### 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.