

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

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы  
электроники, фотоники и  
молекулярной физики  
А.С. Батурин**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Методы моделирования в молекулярной физике: практикум
<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 физики высокотемпературных процессов
<b>курс:</b>	4
<b>квалификация:</b>	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 90 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 60 час.

Самостоятельная работа: 45 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: А.С. Антропов, ассистент

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 03.03.2023

## Аннотация

Курс «Методы моделирования в молекулярной физике: практикум» предусматривает ознакомление студентов с основными методами и алгоритмами компьютерного моделирования в молекулярной физике, а также обучение студентов приемам компьютерного эксперимента для исследования свойств веществ.

### 1. Цели и задачи

#### Цель дисциплины

- ознакомление студентов с основными методами и алгоритмами компьютерного моделирования в молекулярной физике, а также обучение студентов приемам компьютерного эксперимента для исследования свойств веществ.

#### Задачи дисциплины

- формирование у обучающихся представления о возможностях, области применения и задачах, решаемых методом компьютерного моделирования в молекулярной физике;
- приобретение обучающимися знаний об алгоритмах, применяемых в молекулярном моделировании;
- приобретение обучающимися практических навыков по работе с современными пакетами программ, реализующими методы молекулярной динамики и Монте-Карло;
- приобретение обучающимися навыков статистической обработки результатов молекулярного моделирования.

### 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.8 Владеет навыками работы с современными языками программирования и программными пакетами для научных расчетов

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

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- статистические основы молекулярного моделирования;
- порядки физических величин, характерные для атомной и молекулярной физики, физики твердого тела;
- основные алгоритмы, применяемые в молекулярном моделировании;
- основные подходы, используемые при расчетах свойств материалов методами молекулярного моделирования.

уметь:

- проводить расчеты равновесных свойств веществ методами Монте-Карло и молекулярной динамики;
- оценивать статистическую достоверность результатов компьютерного молекулярного моделирования;
- 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 и Интернете;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками обработки результатов численного эксперимента.

### 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	Основные идеи классического атомистического моделирования.		2	5	5
2	Метод молекулярной динамики.		4	8	5
3	Метод Монте-Карло.		3	6	5
4	Молекулярная динамика при постоянной температуре.		3	9	5
5	Фазовые переходы.		5	10	5
6	Релаксационные процессы.		3	6	5
7	Оптимизационные методы.		3	6	5
8	Атомистическое моделирование систем во внешних полях.		2	4	5
9	Расширение методов атомистического моделирования.		5	6	5
Итого часов			30	60	45
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

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

Семестр: 7 (Осенний)

##### 1. Основные идеи классического атомистического моделирования.

Методы классической молекулярной динамики и Монте-Карло. Виды межатомных взаимодействий. Численные методы расчета короткодействующих и далекодействующих сил. Молекулярные модели различных классов веществ: благородные газы, молекулярные газы, металлы, ионные кристаллы, биомолекулы. Молекулярные модели воды.

##### 2. Метод молекулярной динамики.

Численные схемы интегрирования уравнений движения: Эйлера, Верле, rRESPA. Теорема Лиувилля. Периодические граничные условия. Неустойчивость динамических траекторий. Обратимость траекторий. Сохранение энергии. Вычисление термодинамических параметров в методе молекулярной динамики. Структура кода молекулярно-динамического пакета на примере LAMMPS.

##### 3. Метод Монте-Карло.

Эргодическая гипотеза. Каноническое распределение. Принцип детального равновесия. Алгоритм Метрополиса. Вычисление термодинамических потенциалов и статистической суммы методом Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса для NPT ансамбля.

##### 4. Молекулярная динамика при постоянной температуре.

Распределения Максвелла и Гиббса. Термостатирование методом расширенного лагранжиана: термостат Нозе-Гувера. Термостаты Берендсена, Андерсена, Ланжевена.

## 5. Фазовые переходы.

Термодинамика фазового равновесия. Химический потенциал. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса. Фазовые диаграммы. Исследование фазовых диаграмм в молекулярной динамике: двухфазное моделирование. Исследование фазовых диаграмм в методе Монте-Карло: ансамбль Гиббса. Алгоритм Метрополиса для большого канонического ансамбля.

## 6. Релаксационные процессы.

Вычисление коэффициентов переноса в атомистическом моделировании: формулы Грина-Кубо и Эйнштейна-Гельфанда. Метастабильные фазовые состояния. Нуклеация. Конформационные переходы. Методы расчета частоты редких событий.

## 7. Оптимизационные методы.

Алгоритмы оптимизации энергии структур: метод градиентного спуска, метод сопряженных градиентов, алгоритм имитации отжига. Метод упругой ленты для нахождения седловых точек.

## 8. Атомистическое моделирование систем во внешних полях.

Динамика движения частиц во внешнем электромагнитном поле. Поля внешних напряжений в молекулярной динамике.

## 9. Расширение методов атомистического моделирования.

Динамика движения мезоскопических частиц. Гранулярные потенциалы. Периодическая динамика. Основы квантового атомистического моделирования. Метод функционала электронной плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона. Вычисление межатомных сил на основе квантовомеханических расчетов: приближение Борна-Оппенгеймера, теорема Хелмана-Фейнмана.

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

учебная аудитория, компьютеры и мультимедийное оборудование (проектор).

## 6. Перечень рекомендуемой литературы

### Основная литература

- 1) Френкель Д., Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям. Пер. с англ. В.А. Иванов, М.Р. Стукан. М.: Научный мир, 2013. - 578 с.
- 2) Ибрагимов И. М., Ковшов А. Н., Назаров Ю. Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем. СПб.: Лань. 2010.
- 3) Марч Н., Кон В., Вашишта П. и др. Теория неоднородного электронного газа. — М.: Мир, 1987.

### Дополнительная литература

- 1) Полухин В. А., Ватолин Н. А. Моделирование аморфных металлов. М.: Наука, 1985.
- 2) Замалин В.М., Норман Г.Э., Филинов В.С. Метод Монте Карло в статистической термодинамике // М.: Наука, 1977.

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

- 1) <http://scitation.aip.org/>
- 2) <http://www.sciencemag.org/>
- 3) <http://www.elibrary.ru>

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

компьютеры с установленной ОС CentOS GNU/Linux, рабочей средой GNOME, прикладными пакетами OpenOffice.org/LibreOffice, vim, gnuplot (<http://www.gnuplot.info>), MCCCSTowhee (<http://towhee.sourceforge.net>), LAMMPS Molecular Dynamics Simulator (<http://lammps.sandia.gov>), набором компиляторов GNU Compiler Collection.

## **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 физики высокотемпературных процессов
<b>курс:</b>	<u>4</u>
<b>квалификация:</b>	бакалавр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 7 (осенний) - Дифференцированный зачет	
<b>Разработчик:</b>	А.С. Антропов, ассистент

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.8 Владеет навыками работы с современными языками программирования и программными пакетами для научных расчетов

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Методы моделирования в молекулярной физике: практикум» обучающийся должен:

### знать:

- статистические основы молекулярного моделирования;
- порядки физических величин, характерные для атомной и молекулярной физики, физики твердого тела;
- основные алгоритмы, применяемые в молекулярном моделировании;
- основные подходы, используемые при расчетах свойств материалов методами молекулярного моделирования.

### уметь:

- проводить расчеты равновесных свойств веществ методами Монте-Карло и молекулярной динамики;
- оценивать статистическую достоверность результатов компьютерного молекулярного моделирования;
- 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 и Интернете;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками обработки результатов численного эксперимента.

## 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 по теме прошлого занятия.

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

- 1) Написать уравнения для методов численного интегрирования дифференциальных уравнений: Эйлера, Верле, скоростная Верле, leap-frog, Рунге-Кутты 4 порядка.
- 2) Что такое время динамической памяти системы?
- 3) Показать, что схемы интегрирования Верле и скоростная Верле дают одинаковые траектории.
- 4) Привести примеры функциональных форм потенциалов, применяющихся в атомистическом моделировании: парные потенциалы Леннард-Джонса, Морзе, Букингема, многочастичные потенциалы EAM, ADP, Стиллинджера-Вебера, Терсофф. Для каких классов веществ применяются эти потенциалы?
- 5) В чем заключается алгоритм Метрополиса для термодинамического Монте-Карло?
- 6) В чём различие определения температуры в молекулярно-динамическом и Монте-Карло моделировании?
- 7) Сформулировать основные методы для термостатирования, применяемые в молекулярной динамике.
- 8) Показать, что простые численные термостаты — масштабирование скоростей и метод Берендсена — приводят к нарушению равнораспределения энергии по степеням свободы.

- 9) Сформулировать определение короткодействующего потенциала взаимодействия. На каком расстоянии допустимо обрезание потенциала Леннарда-Джонса в флюиде единичной плотности, чтобы ошибка вычисления потенциальной энергии не превысила 1%?
- 10) Оценить число выборок, необходимых для вычисления температуры с точностью 1% при молекулярно-динамическом моделировании кристалла в NVE ансамбле с 1000 частицами.
- 11) Медь имеет кубическую гранецентрированную кристаллическую решетку и плотность 8,92 г/см<sup>3</sup> при нормальных условиях. Определить радиусы первой, второй и третьей координационной сфер и количество атомов в них.
- 12) Что такое уравнение состояния? Сформулировать алгоритм расчета термического уравнения состояния методом атомистического моделирования.
- 13) Что такое автокорреляционная функция? Привести формулы Грина-Кубо для вычисления вязкости и коэффициента диффузии через корреляторы.
- 14) Какова вычислительная сложность различных методов для расчета дальнедействующих сил: метод Эвальда, метод «частица-сетка», метод экранирования потенциала?
- 15) Описать алгоритм выбора радиуса обрезания и коэффициента экранирования в методе Вольфа.
- 16) Метод термодинамического интегрирования: теоретическое обоснование, примеры применения.
- 17) Что такое forcefield для моделирования сложных молекул? Какие взаимодействия учитываются в современных моделях макромолекул?
- 18) Сравнить количество функций, которые нужно вычислить для определения энергии частицы в ГЦК решетке в случае парного потенциала, EAM и ADP потенциалов, обрезаемых на уровне 3 координационной сферы.
- 19) Вывести уравнение Клапейрона-Клаузиуса.
- 20) Привести примеры методов нахождения кривых фазового равновесия в атомистическом моделировании.
- 21) До какой температуры нужно охладить водяной пар при давлении 1 атм, чтобы размер критического зародыша составлял 1000 молекул? Какой при этом будет высота барьера зародышеобразования в единицах kT?
- 22) Оценить частоту перехода молекулы между конформациями, разделенными барьером 1 эВ, при комнатной температуре и при температуре 1000 К. Сопоставить эти частоты с частотой колебаний в молекуле.
- 23) Метод сопряженных градиентов для оптимизации структур в молекулярной механике: формулировка, границы применимости.
- 24) Сформулировать и доказать теорему Хоэнберга-Кона.
- 25) Сформулировать и доказать теорему Хелмана-Фейнмана.

#### 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 балла - 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 балла - 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 балла - 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 балл - 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 дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном дифференцированном зачете не должен превышать одного астрономического часа.