

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы физики
и исследований им. Ландау
А.В. Рогачев**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Квантовая молекулярная динамика
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра вычислительной физики конденсированного состояния и живых систем
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 15 час.

семинары: 15 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 15 час.

Всего часов: 45, всего зач. ед.: 1

Программу составили:

В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент

И.М. Саитов, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры вычислительной физики конденсированного состояния и живых систем 11.03.2025

Аннотация

Предлагаемый курс знакомит студентов с методами современной вантовой лекулярной динамики. Курс состоит из теоретической части, в которой студенты знакомятся с фундаментальными основами используемых методов, и из практической части, в которой студенты учатся пользоваться программными пакетами для расчетов на основе изученных теоретических методов.

В рамках теоретической части в курсе представлены уровни приближений описания электронной структуры в рамках теории функционала электронной плотности (ТФП) для проведения расчетов квантовой молекулярной динамики. Рассматриваются методы расчета как адиабатической, так и неадиабатической динамики. Рассматриваются различные способы расчета возбужденных состояний электронов и их динамики. Рассматриваются методы анализа оптических свойств материалов. Описываются преимущества использования различных типов базисных наборов для представления волновых функций. Представлены методы описания электрон-ионных корреляций на основе функций Ванье.

В рамках практической части курса студенты на вычислительном кластере будут применять представленные в теоретической части методы. Одна из задач курса - дать студентам навыки проведения соответствующих расчетов.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- изучение основных методов и теоретических основ современной квантовой молекулярной динамики с акцентом на исследования неадиабатической динамики и на анализе оптических свойств вещества.

Задачи дисциплины

- освоение студентами базовых знаний в области квантового молекулярного моделирования;
- приобретение теоретических знаний в области теории функционала плотности и ее специальных разделов;
- изучение различных пакетов квантового молекулярного моделирования;
- обучение студентов подбору и настройке современных программных пакетов для квантового моделирования.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения

УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.2 Способен прогнозировать результат деятельности и планировать последовательность шагов для достижения данного результата. Формирует план-график реализации проекта в целом и план контроля его выполнения
	УК-2.3 Способен организовать и координировать работу участников проекта, обеспечивать работу команды необходимыми ресурсами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности

решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	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
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- Основы теории функционала плотности и метода квантовой молекулярной динамики в адиабатическом приближении и неадиабатическом приближении.
- Методы расчет возбужденных состояний в материалах.
- Методы расчета оптических свойств в рамках ТФП.
- Метод функций Ванье локализации электронных орбиталей.

уметь:

- Проводить расчеты уравнения состояния и оптических свойств в рамках ТФП.
- Проводить расчеты возбужденных состояний системы.
- Проводить расчеты методами неадиабатической динамики.
- Проводить локализацию электронных орбиталей.
- Проводить моделирование термодинамических свойств с использованием метода молекулярной динамики на интегралах по траекториям.

владеть:

- Пакетом для расчетов методом ТФП (VASP, Quantum Espresso, CPMD).

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	Обзор численных решений уравнения Шредингера	2	2		2
2	Метод адиабатической молекулярной динамики DFT	1	1		1
3	Расчеты в основном состоянии ТФП	2	2		2
4	Расчеты методами конечно-температурной ТФП	1	1		1

5	Расчет оптических свойств в рамках ТФП	2	2		2
6	Учет возбужденных состояний в рамках ТФП: ROKS	1	1		1
7	Учет возбужденных состояний в рамках время зависящей ТФП: TD DFT	1	1		1
8	Метод неадиабатической молекулярной динамики ТФП: Метод среднего поля	1	1		1
9	Метод неадиабатической молекулярной динамики ТФП: Surface Hopping	1	1		1
10	Метод неадиабатической молекулярной динамики в рамках волновых пакетов: WPMD (eFF)	1	1		1
11	Метод молекулярной динамики на интегралах по траекториям в рамках ТФП. Энергия Нулевых колебаний	1	1		1
12	Максимально локализованные орбитали Ванье	1	1		1
Итого часов		15	15		15
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		45 час., 1 зач.ед.			

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

Семестр: 1 (Осенний)

1. Обзор численных решений уравнения Шредингера

Будет сделан обзор следующих методов и их применимости: аналитический метод, метод возмущений, метод Хартри-Фока. Так же будет проведено введение в теорию функционала плотности, функции Грина. Студенты попробуют запустить простейшие пакеты квантовых расчетов.

2. Метод адиабатической молекулярной динамики DFT

Будет рассмотрена Борн-Оппенгеймерская молекулярная динамика. Молекулярная динамика Кара-Паринелло. Рассмотрены приближения и область применимости этих методов.

3. Расчеты в основном состоянии ТФП

Введение в теорию функционала плотности. Влияния базисов, приближения обменно-корреляционного функционала. Плотность электронных состояний. Будут рассмотрены наиболее популярные пакеты расчетов в рамках теории функционала плотности.

4. Расчеты методами конечно-температурной ТФП

Рассмотрен метод теории функционала плотности в формулировке конечных температур. Рассмотрены приближения, которые необходимы в этой теории, а также границы ее применимости. Обсуждается вопрос описания электронных переходов в рамках этих подходов.

5. Расчет оптических свойств в рамках ТФП

Будут рассмотрены различные методы расчета диэлектрической проницаемости в приближении теории линейного отклика в длинноволновом пределе в рамках ТФП. Расчет с использованием формул для продольного и поперечного тензоров ДП. Учет эффектов локального поля. Также будут рассмотрены различные приближения для учета обменно-корреляционного взаимодействия: от приближения невзаимодействующих электронов до метода гриновских функций (GW)

6. Учет возбужденных состояний в рамках ТФП: ROKS

Рассматривается модель перехода электрона в возбужденное состояние с различными вариантами расположения спинов. Строится теория описания первого возбужденного состояния электрона и сравнивается с допущениями конечно-температурной теории. Проводится расчет водорода в рамках метода ROKS и рассматриваются различные варианты перехода (синглетное, триплетное), проводится анализ молекулярных орбиталей.

7. Учет возбужденных состояний в рамках время зависящей ТФП: TD DFT

Рассматриваются основы TDDFT. Изучение влияния учета экситонных состояний на оптические свойства вещества при различных условиях в рамках теории функционала плотности с зависимостью от времени на основе решений уравнений Бете-Солпитера. Обзор программных пакетов для TD DFT.

8. Метод неадиабатической молекулярной динамики ТФП: Метод среднего поля

Рассматривается неадиабатическая динамика квантовой системы методом среднего поля (методом Эренфеста). Исследуется применимость метода в моделях химических реакций.

9. Метод неадиабатической молекулярной динамики ТФП: Surface Hopping

Рассматривается неадиабатическая динамика квантовой системы с возможностью перескоков электронов между основным и возбужденным состоянием. Применение ROKS, ограничение на количество возбужденных состояний, границы применимости.

10. Метод неадиабатической молекулярной динамики в рамках волновых пакетов: WPMD (eFF)

Рассматриваются основы полуклассического приближения квантовой теории. Метод волновых пакетов и различные варианты представления электронов. В качестве одной из реализаций метода волновых пакетов рассматривается метод electron Force Field.

11. Метод молекулярной динамики на интегралах по траекториям в рамках ТФП. Энергия Нулевых колебаний

Изучение влияния нулевых колебаний на уравнение состояния и структурные свойства применительно к системам, содержащим водород.

12. Максимально локализованные орбитали Ванье

Рассматривается метод максимально локализованных орбиталей Ванье, широко применяемых при расчетах периодических структур. Изучаются критерии применимости метода и случаи, в которых такие орбитали могут расширить информацию о системе.

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

Компьютеры, мультимедийное оборудование (проектор), экран, доступ к вычислительному кластеру, доска, мел или маркеры.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] / В. Г. Цирельсон - М. БИНОМ. Лаб. знаний, 2010
2. Marzari N. et al. Maximally localized Wannier functions: Theory and applications // Reviews of Modern Physics. – 2012. – Т. 84. – №. 4. – С. 1419.
3. Doltsinis N. L., Marx D. First principles molecular dynamics involving excited states and nonadiabatic transitions // Journal of Theoretical and Computational Chemistry. – 2002. – Т. 1. – №. 02. – С. 319-349.
4. Jaramillo-Botero A. et al. Large-scale, long-term nonadiabatic electron molecular dynamics for describing material properties and phenomena in extreme environments // Journal of computational chemistry. – 2011. – Т. 32. – №. 3. – С. 497-512.

Дополнительная литература

1. Atkins P. W., Friedman R. S. Molecular quantum mechanics. – Oxford university press, 2011.
2. Mahan G. D. 9. Many-Particle Systems. – Princeton University Press, 2008. – С. 288-319.

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

Базы данных по журналам Physical Review, J of Chemical Physics, ЖЭТФ, ТВТ, УФН и др.

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

На лекционных занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций.

На практических занятиях используются компьютеры и вычислительный кластер (многопроцессорная и многоузловая система с графическими ускорителями и системой очередей) с возможностью удалённого доступа.

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 и понятия, 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.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра вычислительной физики конденсированного состояния и живых систем
курс:	<u>1</u>
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

Разработчики:

В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент

И.М. Саитов, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения
	УК-2.2 Способен прогнозировать результат деятельности и планировать последовательность шагов для достижения данного результата. Формирует план-график реализации проекта в целом и план контроля его выполнения
	УК-2.3 Способен организовать и координировать работу участников проекта, обеспечивать работу команды необходимыми ресурсами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений

ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
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
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Квантовая молекулярная динамика» обучающийся должен:

знать:

- Основы теории функционала плотности и метода квантовой молекулярной динамики в адиабатическом приближении и неадиабатическом приближении.
- Методы расчет возбужденных состояний в материалах.
- Методы расчета оптических свойств в рамках ТФП.
- Метод функций Ванье локализации электронных орбиталей.

уметь:

- Проводить расчеты уравнения состояния и оптических свойств в рамках ТФП.
- Проводить расчеты возбужденных состояний системы.
- Проводить расчеты методами неадиабатической динамики.
- Проводить локализацию электронных орбиталей.
- Проводить моделирование термодинамических свойств с использованием метода молекулярной динамики на интегралах по траекториям.

владеть:

- Пакетом для расчетов методом ТФП (VASP, Quantum Espresso, CPMD).

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

Примеры контрольных заданий для текущего контроля:

- 1) Запустить расчет водорода в первом синглетном состоянии и в основном состоянии, рассчитать разницу в энергиях.
- 2) Опишите кратко суть метода Хартри-Фока. В каких системах его применение нецелесообразно?

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

1. Формула для продольного тензора диэлектрической проницаемости в рамках теории линейного отклика в длинноволновом пределе.
2. Формула Линхарда.
3. Формула Кубо и Кубо-Гринвуда.
4. Отличие от выражения для продольного тензора ДП.
5. В чем основное приближение динамики Борн-Оппенгеймера?
6. Почему теория функционала плотности в формулировке конечных температур не может точно описать возбужденное состояние электронов?
7. Напишите теорему Гельмана-Фейнмана.
8. Из каких соображений строится теория Surface-Hopping?
9. Рассчитать давление и парную корреляционную функцию вещества при заданных условиях в рамках квантового метода молекулярной динамики.
10. Исследовать полученные результаты на сходимость по параметрам расчета.
11. Рассчитать давление и парную корреляционную функцию вещества при заданных условиях в рамках метода молекулярной динамики на интегралах по траекториям.
12. Исследовать полученные результаты на сходимость по параметрам расчета.
13. Сравнить с результатами расчета в адиабатическом приближении.
14. Расчёт диэлектрической проницаемости, статической электропроводности и коэффициента отражения рассматриваемого вещества при заданных условиях.
15. Определение характера проводимости.
16. Исследование сходимости полученных результатов от параметров расчета.
17. Учет влияния эффектов локального поля на оптические свойства.

Примеры билетов:

Билет 1.

1. Отличие от выражения для продольного тензора ДП.
2. Рассчитать давление и парную корреляционную функцию вещества при заданных условиях в рамках метода молекулярной динамики на интегралах по траекториям.

Билет 2.

1. Формула Кубо и Кубо-Гринвуда.
2. Исследование сходимости полученных результатов от параметров расчета.

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

Дифференцированный зачёт проводится в письменной и устной форме по билетам. В каждом билете представлен один теоретический вопрос и одно практическое задание. При проведении зачёта обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.