

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет
Кафедра химической и биологической физики**

УТВЕРЖДАЮ
Декан ФФ
А. Е. Бондарь
«07» 10 2020 г.

академик РАН



Рабочая программа дисциплины

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

направление подготовки: **03.04.02 Физика, Курс 1, семестр 2**
направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения
Очная

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
2	72	16		32	2	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 52 часа - в интерактивных формах 32 часа										
Компетенции ПК-1, ПК-2										

Разработчик:
д.ф.-м.н.

 Н. Н. Медведев

Зав. кафедрой ХиБФ ФФ НГУ
д.ф.-м.н., проф.

 С. А. Дзюба

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

 И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2020

Содержание	
Аннотация	3
1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	4
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.	5
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	6
5. Перечень учебной литературы.	11
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	11
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	11
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	11
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	12
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	12

Аннотация

к рабочей программе дисциплины курса «Молекулярная динамика»

Направление: **03.04.02 Физика**

Направленность (профиль): Общая и фундаментальная физика

Программа дисциплины «Молекулярная динамика» составлена в соответствии с требованиями СУОС к уровню магистратуры по направлению подготовки **03.04.02 Физика, направленность «Общая и фундаментальная физика»**, а также задачами, стоящими перед Новосибирским государственным университетом по реализации Программы развития НГУ. Дисциплина реализуется на физическом факультете Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ) кафедрой химической и биологической физики в качестве дисциплины по выбору. Дисциплина изучается студентами первого курса магистратуры физического факультета в весеннем семестре.

Цель курса – знакомство с основами современного метода классической молекулярной динамики и его применением к задачам моделирования многочастичных физико-химических систем, таким как жидкости и растворы, для изучения их структурных и динамических свойств на молекулярном уровне.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующих профессиональных компетенций:

ПК-1 способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта

ПК-2 способность свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **Знать:** методологические предпосылки возникновения метода молекулярной динамики, области и границы ее применения, основные потенциалы и поля сил для описания межмолекулярного взаимодействия, способы расчета основных структурных, динамических и термодинамических характеристик исследуемой системы;
- **Уметь:** определять наиболее подходящую модель для описания изучаемой системы, моделировать равновесные свойства жидкостей и растворов, используя известный пакет программ GROMACS;
- **Владеть:** навыками моделирования методом молекулярной-динамики фазовых переходов в конденсированном состоянии, наночастиц и супрамолекулярных систем в разных термодинамических ансамблях.

Курс рассчитан на один семестр (2-й). Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, лабораторные занятия, консультации, самостоятельная работа студента, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: решение задач из задания для самостоятельного решения

Промежуточная аттестация: экзамен

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет **72** академических часа / **2** зачетных единицы.

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Цель учебного курса «Молекулярная динамика» – дать слушателям набор необходимых сведений в области компьютерного моделирования атомных и молекулярных жидкостей, кристаллов, фазовых переходов, наночастиц, для изучения их структуры и динамики на микроуровне, а также получение практических навыков использования этих знаний для научной работы в области химической физики, физической физики и молекулярной биологии.

Профессиональная компетенция ПК-1 - способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области молекулярной динамики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта.

Профессиональная компетенция ПК-2 - способность свободно владеть разделами молекулярной динамики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.

Материал лекционного курса обязательно увязывается с результатами научных исследований на уровне, доступным для студентов. Специально указываются темы, активно обсуждаемые в текущей профессиональной научной литературе. Все практические занятия проводятся в интерактивной форме. На отдельном компьютере работает не более чем 1-2 студента. У преподавателя есть возможность увидеть трудности в понимании темы данным студентом и помочь ему в преодолении имеющегося непонимания. На практических занятиях студенты учатся работать с реальными пакетами молекулярно-динамического моделирования и возможностями для визуализации результатов. Помимо общих для всей группы учебных задач, каждый студент получает индивидуальное расчетное задание в соответствии с профилем его/ее научной деятельности. Такая практика способствует уяснению роли и места метода молекулярной динамики в реальной научной работе. Обращается внимание не только на умение студента найти решение поставленной задачи, но и донести его до всей аудитории. Умение сходу отвечать на вопросы коллег и преподавателя развивает профессиональные навыки, которые будут незаменимы в дальнейшей профессиональной деятельности.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **Знать:** методологические предпосылки возникновения метода молекулярной динамики, области и границы ее применения, основные потенциалы и поля сил для описания межмолекулярного взаимодействия, способы расчета основных структурных, динамических и термодинамических характеристик исследуемой системы (ПК-1.1);
- **Уметь:** определять наиболее подходящую модель для описания изучаемой системы, моделировать равновесные свойства жидкостей и растворов, используя известный пакет программ GROMACS (ПК-1.2);
- **Владеть:** навыками моделирования методом молекулярной-динамики фазовых переходов в конденсированном состоянии, наночастиц и супрамолекулярных систем в разных термодинамических ансамблях (ПК-2.3)

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Молекулярная динамика» реализуется для обучающихся по направлению подготовки 03.04.02 Физика. Общая и фундаментальная физика. При изучении курса магистранты должны усвоить, что основные подходы для моделирования поведения атомов и молекул в больших системах базируются на законах и принципах, изученных ими ранее в разделах физики (аналитическая механика, статистическая физика, термодинамика), а также по теории

вероятности, методам вычисления, программирования. Необходимыми предпосылками для успешного освоения курса являются следующие разделы математики: математический анализ, дифференциальные уравнения, вычислительные методы в объеме, достаточном для численного решения линейных дифференциальных уравнений и вычисления интегралов, основ и методов теории вероятности. В цикле общефизических дисциплин необходимыми предпосылками являются: твердое понимание и умение применять основные принципы классической механики, статистической физики и термодинамики. Метод молекулярной динамики непосредственно базируется на указанных дисциплинах и предназначен для решения задач, относящихся к данным областям науки.

Развитие программных комплексов, ориентированных на широкую аудиторию пользователей (не только на специалистов-теоретиков и программистов, но и на экспериментаторов) превращает метод молекулярной динамики и ценный инструмент исследований в физике и химии, который может быть реализован, при возникновении потребности, практически в каждой научной лаборатории. Знание современного состояния метода молекулярной динамики и умение ориентироваться в современной литературе по компьютерному моделированию, проводить простые расчеты необходимо самым разным специалистам в области физической химии и химической физики.

Владение основами метода классической молекулярной динамики необходимо, или по крайней мере полезно как предшествующее знание, при изучении других курсов (дисциплин) важных для современной науки, в частности, физики жидкости и растворов, термодинамики, теории супрамолекулярных структур, наночастиц и др.), а также при прохождении научной практики в лабораториях институтов СО РАН.

3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
2	72	16		32	2	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 52 часа - в интерактивных формах 32 часа										
Компетенции ПК-1, ПК-2										

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, лабораторные занятия, консультации, самостоятельная работа студента, и ее контроль преподавателем с помощью заданий, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: решение задач из задания для самостоятельного решения

Промежуточная аттестация: экзамен

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет **72** академических часа / **2** зачетных единицы.

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачётные единицы, 72 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоёмкость (в часах)				Консультации перед экзаменом (часов)	Промежуточная аттестация (в период сессии) (в часах)	
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)			Сам. работа во время промежуточной аттестации
				Лекции	Лабораторные занятия				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1.	Основные понятия метода молекулярной динамики. История возникновения. Современные приложения. Первые работы Олдера и Уэйрайта. Соотношение между компьютерным и реальным экспериментом. Эргодичность. Эвристичность. Проблемы репрезентативности модели. Возможности и ограничения метода. Примеры современного моделирования в физической химии и материаловедении.	1	2	2					
2	Общие подходы.	2-4	8	4	4				

	<p>Уравнения движения для системы большого числа одноатомных (сферически-симметричных) частиц.</p> <p>Численные методы решения системы уравнений движения.</p> <p>Алгоритм Верле.</p> <p>Периодические граничные условия.</p> <p>Одноатомные системы. Анализ структуры и динамики.</p> <p>Потенциал Леннарда-Джонса.</p> <p>Парная корреляционная функция атомов.</p> <p>Автокорреляционная функция скорости. Анализ трехмерной структуры</p>								
3	<p>Практическое моделирование простых жидкостей.</p> <p>Знакомство с пакетом GROMACS и системой LINUX.</p> <p>Создание исходной конфигурации.</p> <p>Релаксация системы. Моделирование равновесного состояния жидкости. Анализ функции радиального распределения, автокоррелятора скорости, коэффициента самодиффузии.</p>	5-6	8		8				
4.	Вода и водные	7	4	2	2				

	растворы. Особенности строения воды. Особенности моделирования воды Модели воды. Моделирование «с ограничениями», Учет электростатического взаимодействия.								
5.	Практическое моделирование жидкой воды. Создание исходной конфигурации. Релаксация. Получение равновесной модели. Анализ структуры. Расчет числа водородных связей и коэффициента самодиффузии. Сравнение разных моделей воды Tip4pSPC/E Расчет плотности воды при разных температурах.	8	4		4				
6.	Молекулярные системы. Феноменологическое представление взаимодействия между атомами молекулы. Валентные, деформационные, торсионные взаимодействия. Топология молекулы. Поля сил. Парциальные функции радиального распределения.	9-10	10	4	4				
7.	Практическое моделирование молекулярных систем. Создание моделей и анализ	11-12	2		2				

	жидкого гексана и его изомеров. Расчет парциальных функций радиального распределения. Расчет плотности полученных жидкостей								
8.	Метод Монте-Карло и его связь с методом молекулярной динамики. Алгоритм Метрополиса. Задачи, решаемые методом Монте-Карло. Конфигурационное пространство многочастичной системы	13-14	4	4					
9.	Практическое занятие по моделированию протеина в воде. Использование данных о белке (доступных через интернет) для моделирования равновесной конфигурации белка в воде. Расчет радиуса гирации. End-to-end распределение.	15-16	10		8	2			
10.	Самостоятельная работа в период подготовки к промежуточной аттестации		18				18		
11.	Экзамен		4					2	2
Всего			72	16	32	2	18	2	2

Программа и основное содержание лекций (16 часов)

1. Основные понятия метода молекулярной динамики. (2 часа)

История возникновения. Первые работы Олдера и Уэйрайта. Соотношение между компьютерным и реальным экспериментом. Эргодичность. Эвристичность. Проблемы репрезентативности

модели. Возможности и ограничения метода. Современные приложения в физической химии и материаловедении.

2. Общие подходы. (4 часа)

Уравнения движения для системы большого числа одноатомных (сферически- симметричных) частиц. Численные методы решения системы уравнений движения. Алгоритм Верле. Периодические граничные условия. Одноатомные системы. Анализ структуры и динамики. Потенциал Леннарда-Джонса. Парная корреляционная функция атомов. Автокорреляционная функция скорости. Анализ трехмерной структуры

3. Вода и водные растворы. (2 часа)

Особенности строения воды. Особенности моделирования воды Модели воды. Моделирование «с ограничениями», Учет электростатического взаимодействия.

4. Молекулярные системы. (4 часа)

Феноменологическое представление взаимодействия между атомами молекулы. Валентные, деформационные, торсионные взаимодействия. Топология молекулы. Поля сил. Парциальные функции радиального распределения.

5. Метод Монте-Карло и его связь с методом молекулярной динамики. (4 часа)

Алгоритм Метрополиса. Задачи, решаемые методом Монте-Карло. Конфигурационное пространство многочастичной системы

Программа лабораторных занятий (32 часа)

1. Практическое моделирование простых жидкостей. (12 часов)

Знакомство с пакетом GROMACS и системой LINUX. Создание исходной конфигурации. Релаксация системы. Моделирование равновесного состояния жидкости. Анализ функции радиального распределения, автокоррелятора скорости, коэффициента самодиффузии

2. Практическое моделирование жидкой воды. (6 часов)

Создание исходной конфигурации. Релаксация. Получение равновесной модели. Анализ структуры. Расчет числа водородных связей и коэффициента самодиффузии. Сравнение разных моделей воды Tip4pSPC/E Расчет плотности воды при разных температурах.

3. Практическое моделирование молекулярных систем. (6 часов)

Создание моделей и анализ жидкого гексана и его изомеров. Расчет парциальных функций радиального распределения. Расчет плотности полученных жидкостей

4. Практическое занятие по моделированию протеина в воде (8 часов)

Использование данных о белке (доступных через интернет) для моделирования равновесной конфигурации белка в воде. Расчет радиуса гирации. End-to-end распределение.

Самостоятельная работа студентов (20 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к лабораторным занятиям.	2 часа
Подготовка к экзамену	18 часов

5. Перечень учебной литературы.

5.1. Основная литература

1. Ким А.В., Медведев Н.Н. Молекулярная динамика. Практические занятия. НГУ. 2015.

5.2. Дополнительная литература

1. Д. К. Рапапорт Искусство молекулярной динамики, М: Регулярная и хаотическая динамика, 2012.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

размещенными на сайте кафедры <http://www.hf.nsu.ru>.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

Интернет-ресурсы:

1. <http://www.hf.nsu.ru/study.html>

7.1 Современные профессиональные базы данных

Не используются.

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Программное обеспечение:

1. <http://www.hf.nsu.ru/study.html>
2. <http://www.gromacs.org/Documentation/Manual>

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины Молекулярная динамика используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации;
2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;
3. Лаборатории;
4. Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется по оценочной системе в виде теоретического опроса (контрольных вопросов на знание материала предыдущей лекции), заданий для самостоятельного решения. Оценка знаний, умений, навыков и освоения компетенций обучающимися в рамках текущего контроля может проводиться согласно шкале и критериям, представленным ниже.

Оценка за работу в семестре учитывает активность студента на лабораторных занятиях, посещение семинаров, оценки за теоретические опросы, проводимые в течение семестра, а также количество сданных задач из заданий для самостоятельного решения и выполнения практической работы на компьютере. За работу в семестре выставляется оценка «неудовлетворительно» в случае одновременного получения неудовлетворительной оценки за теоретические опросы, сдачи менее 80% задач из заданий и сдачи менее 80% процентов практических задач на компьютере.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленные компетенции ПК-1 и ПК-2 сформированы не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области молекулярной динамики в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию по билетам в устной форме. Билет состоит из двух вопросов и задачи. Вопросы билета подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенций ПК-1 и ПК-2.

Для получения оценки «отлично» (продвинутый уровень усвоения компетенций) необходимо развёрнуто ответить на два вопроса из билета, правильно ответить на дополнительные вопросы, решить задачу и иметь решенными 100% задач из заданий и 100% процентов практических задач на компьютере.

Для получения оценки «хорошо» (базовый уровень усвоения компетенций) нужно ответить на два вопроса билета и дополнительные вопросы. Допускается несколько несущественных ошибок при ответе на вопросы билета и дополнительные вопросы. При этом, должно быть сдано не менее 90% задач из заданий и 100% процентов практических задач на компьютере в установленные программой курса сроки.

Для получения на устном экзамене оценки «удовлетворительно» (пороговый уровень усвоения компетенций) необходимо ответить хотя бы на один вопрос в билете и сдать не менее 80% задач из заданий и не менее 80% процентов практических задач на компьютере в установленные программой курса сроки.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос билета оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Молекулярная динамика».

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 1.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.

Наличие навыков (владение опытом)	ПК 2.3	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.
-----------------------------------	--------	--	--	--	---

Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примеры типовых заданий для самостоятельного решения для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся.

1. Выписать силу, действующую между двумя частицами, расположенными на расстоянии r друг от друга и взаимодействующими по законам:

а) $U(r) = C12/r12 - C6/r6$

б) $U(r) = A \exp(-Br) - C/r6$

в) $U(r) = Q1Q2/r$

Указание: выписать в явном виде компоненты вектора силы, действующей на частицу i в точке с координатами x_i, y_i, z_i , со стороны частицы j , расположенной в точке x_j, y_j, z_j .

2. Создать начальную конфигурацию для модели, состоящей из N атомов, расположенных в узлах заданной кристаллической решетки внутри модельного бокса.

а) ПК, Базис решетки: 1: (0,0,0)

б) ОЦК, 2: (0,0,0; 1/2, 1/2, 1/2)

в) ГЦК, 4: (0,0,0; 1/2, 1/2, 0; 1/2, 0, 1/2; 0, 1/2, 1/2)

Указание: Написать алгоритм формирования массива $A(1:3, 1:N)$, содержащего координаты N атомов. Для этого нужно оттранслировать базис решетки вдоль осей решетки (по px, py и pz раз). Данные решетки являются кубическими.

3. Выписать топологию молекулы

а) циклогексана

б) 2,3-диметилбутана

в) изопропилового спирта

Указание: для заданной нумерации атомов в молекуле выписать таблицы, содержащие для каждого атома номера его первых соседей (массив [bonds], как принято в пакете GROMACS), первых и вторых ([angles]), первых, вторых и третьих [dihedrals].

4. Написать алгоритм расчета потенциальной энергии i -ого атома заданной конфигурации МД модели из N атомов, взаимодействующих с парным потенциалом $U(r)$ в модельном боксе с периодическими граничными условиями.

а) кубический бокс с ребром a .

б) прямоугольный бокс с ребрами a, b, c

в) бокс с углом $\alpha \neq 90$ между двумя осями (моноклинный)

Вопросы на экзамен

На проверку сформированности компетенции ПК-1:

Общее

1. Что такое классическая молекулярная динамика (МД)?

2. Примеры задач, решаемые классической МД?
3. Примеры задач, для которых классическая МД оказывается неприменимой?
4. Основные этапы МД моделирования?
5. Что представляет собой молекулярно-динамическая модель?
6. Какую информацию можно извлекать из МД модели?
7. Особенности моделирования одноатомных систем. Потенциалы межатомного взаимодействия?
8. Особенности моделирования воды. Модели воды?
9. Особенности моделирования молекулярных систем. Топология молекулы. Поле сил.
10. Метод МК. Отличие и общее между МД и МК?

Физические основы

1. Ньютоновская механика.
Уравнения движения системы материальных точек. Фазовая траектория.
Потенциальная и кинетическая энергия.
Системы взаимодействующих частиц. Парное и непарное приближение,
2. Статистическая физика.
Термодинамические ансамбли (NVE, NVT, NPT).
Плотность вероятности состояния. Конфигурационный интеграл.
Среднее значение и флуктуации наблюдаемой величины. Усреднение по траектории
Усреднение по конфигурационному пространству. Эргодичность.

Вычислительные методы

1. Вывод алгоритма Верле, его точность.
2. Устойчивость МД траектории.
3. Периодические граничные условия. Принцип ближайшего образа.
4. Описание движения точек с наложенными ограничениями.
5. Генераторы случайных чисел.
На проверку сформированности компетенции ПК-2:
6. Алгоритм Метрополиса.
Анализ МД моделей.
 - 1 Термодинамические характеристики.
Расчет полной, потенциальной и кинетической энергии, температуры, давления.
 2. Структурные параметры.
Функция радиального распределения (ФРР). Характерный вид для жидкости, кристалла, стекла.
Парциальные ФРР для молекулярных систем и растворов.
Трехмерная структура, симплекс Делоне, область Вороного. Топологические и метрические характеристики.
 3. Динамические свойства.
Диффузия, среднеквадратичное смещение, коэффициент самодиффузии.
Автокоррелятор скорости.
 4. Особенности изучения органических и биологических молекул.
Поверхности и объема молекулы. Конформационные переходы.
Среднеквадратичное отклонение атомов молекулы. Радиус гирации.
End-to-end распределение.

Примеры задач к экзамену по дисциплине «Молекулярная динамика».

1. Потенциалы, силы, взаимодействия.
 - 1.1. Потенциал Леннарда-Джонса. $U(r) = -4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$
 - а) Найти равновесное положение между парой частиц, взаимодействующих

с этим потенциалом.

б) найти силу, действующими между такими частицами.

2. Технические вопросы МД.

2.1 Вывести алгоритм Верле для численного решения системы уравнений движения частиц, взаимодействующих друг с другом с парным потенциалом $U(r)$.

2.2. Написать алгоритм расчета центра тяжести молекулы из M атомов расположенной в кубе с периодическими граничными условиями и ребром L .

Пример экзаменационного билета

<p>МИНОБРНАУКИ РОССИИ</p> <p>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)</p> <p>Физический факультет</p>
<p>ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____</p> <p>1. Что такое классическая молекулярная динамика (МД)? (на компетенцию ПК-1)</p> <p>2. Технические вопросы МД (на компетенцию ПК-2).</p> <p>2.1 Вывести алгоритм Верле для численного решения системы уравнений движения частиц, взаимодействующих друг с другом с парным потенциалом $U(r)$.</p> <p>2.2. Написать алгоритм расчета центра тяжести молекулы из M атомов расположенной в кубе с периодическими граничными условиями и ребром L.</p> <p>Составитель _____ / Медведев Н.Н. / (подпись)</p> <p>« ____ » _____ 20 г.</p>

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации фонда оценочных средств
по дисциплине «Молекулярная динамика»
по направлению подготовки 03.04.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного