

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.

