

«

»

“

”

. . .

. . .

31.08.2022

: . . . . .

:

:

<https://www.nstu.ru/university/info/sveden/education>

# РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

## Молекулярная динамика

: 22.03.01

,

:

: 4,

: 7

-		,
		7
1	( )	4
2		144
3	, .	56
4	, .	18
5	, .	34
6	, .	0
7	, .	10
8	, .	8
9	, .	2
10	, .	2
11	, .	88
12	( , ( )/ , )	
13		

( ): 22.03.01

701 02.06.2020 ., : 10.07.2020 .

: 1,

( ): 22.03.01

, 31.08.2022

- , 6 31.08.2022

:

, . . . . .

:

. .

# 1.

1.1

	-4
	-4. 1 - ,
	-8
	-8. 2 -
	-1 , ,
	-1. 1 , .

## 2.

,

2.1

<b>ОПК-4. 1 Составляет отчеты по учебно-исследовательской деятельности, включая анализ экспериментальных результатов, сопоставления их с известными аналогами</b>	
	;
<b>ОПК-8. 2 Умеет применять современные информационно-коммуникационные технологии и программные средства для решения задач профессиональной деятельности с соблюдением норм информационной безопасности</b>	
	;
<b>УК-1. 1 Знает принципы сбора, отбора и обобщения информации.</b>	
	;

# 3.

3.1

		„ .	, .	
: 7				
:				
1. ( , N )	2	0	0	-1.1
2. ( , , , , )	2	0	0	-1.1
3. .	2	0	0	-1.1

4.	، .	2	0	0	-1.1
5.	. , ,	2	0	0	-1.1
6.	. LAMMPS	2	0	0	-1.1
7.		2	0	0	-1.1
8.		4	0	0	-1.1

		، .	، .		
: 7					
:					
1.		6	1	6	-4.1, -8.2
2.	LAMMPS	4	1	4	-4.1, -8.2
3.		4	1	0	-4.1, -8.2
4.		4	1	0	-4.1, -8.2
5.		4	1	0	-4.1, -8.2
6.		4	1	0	-4.1, -8.2
7.		4	1	0	-4.1, -8.2
8.		4	1	0	-4.1, -8.2
Python					

3.1

3.2

			( )
1			: ، ، -
2	LAMMPS		: ، ، -

3			
4			
5			
6			
7			
8	Python		

### 3.2

### 3.3

: 7				
1	/	-4.1, 8.2, -1.1	36	0
: . . 1: / . . ; . . . -.- : - , 2014.- 185, [1] .: .- : <a href="http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000208180">http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000208180</a>				
2		-4.1, 8.2, -1.1	20	0
: . . . 1: / . . ; . . . -.- : - , 2014.- 185, [1] .: .- : <a href="http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000208180">http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000208180</a>				
3		-4.1, 8.2, -1.1	2	0
: . . . 1: / . . ; . . . -.- : - , 2014.- 185, [1] .: .- : <a href="http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000208180">http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000208180</a>				
4		-4.1, 8.2, -1.1	26	2
: . . . 1: / . . ; . . . -.- : - , 2014.- 185, [1] .: .- : <a href="http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000208180">http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000208180</a>				
5		-4.1, 8.2, -1.1	4	0
: . . . 1: / . . ; . . . -.- : - , 2014.- 185, [1] .: .- : <a href="http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000208180">http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000208180</a>				

### 3.3

$$- \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\rho} \right) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\rho} \right), \quad (3.4).$$

3.4

	-
	;

---

3.5

1	-
<b>Краткое описание применения:</b>	

2	
<b>Краткое описание применения:</b>	

**4.**

 $(\quad),$ 

-  
15- ECTS.

. 4.1.

4.1

	.	
<b>: 7</b>		
<i>Лекция:</i>	5	10
<i>Практические занятия:</i>	5	40
<i>РГЗ/Реферат:</i>	5	30
<i>Зачет:</i>	10	20

---

4.2

4.2

			/	
-4	-4 1.	- ,	+	+

-8	-8 2. -	+	+
-1	-1 1. , .	+	+

1

## 5.

1. Программные системы статистического анализа. Обнаружение закономерностей в данных с использованием системы R и языка Python : [учебное пособие / В. М. Волкова и др.] ; Новосиб. гос. техн. ун-т.- Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2017.- 72, [1] с. : табл.- Режим доступа: [http://elibrary.nstu.ru/source?bib\\_id=vtls000234496](http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000234496)

2. Березин Н. Ю. Физика в лекционных демонстрациях. Механика : учебное пособие / Н. Ю. Березин, Н. Ю. Петров ; Новосиб. гос. техн. ун-т.- Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2021.- 61, [2] с. : ил.- Текст : непосредственный.- Режим доступа: [http://elibrary.nstu.ru/source?bib\\_id=220746](http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=220746)

1. Батаев И. А. Кристаллография. Индексирование граней и ребер кристаллов : [учебное пособие] / И. А. Батаев, А. А. Батаев, С. В. Веселов ; Новосиб. гос. техн. ун-т.- Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2019.- 115, [2] с. : ил.- Режим доступа: [http://elibrary.nstu.ru/source?bib\\_id=vtls000240501](http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000240501)

1. Новосибирский государственный технический университет НЭТИ : сайт / учредитель: ФГБОУ ВО «Новосибирский государственный технический университет» ; глав. ред. А. А. Батаев. – Новосибирск, 1994– . – URL: <https://nstu.ru/> (дата обращения: 09.09.2022).

## 6.

### 6.1

1. Сарина М. П. Механика. Молекулярная физика и термодинамика. Ч. 1 : учебное пособие / М. П. Сарина ; Новосиб. гос. техн. ун-т.- Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2014.- 185, [1] с. : ил.- Режим доступа: [http://elibrary.nstu.ru/source?bib\\_id=vtls000208180](http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000208180)

### 6.2

### 6.3

## 7.

1	BENQ PB 6240	

2		
---	--	--



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Новосибирский государственный технический университет»

Кафедра материаловедения в машиностроении

“УТВЕРЖДАЮ”  
ДЕКАН МТФ  
к.т.н., доцент А.Г. Тюрин  
“    ”    \_\_\_\_\_    \_\_\_\_\_ г.

## ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

### ДИСЦИПЛИНЫ

#### **Молекулярная динамика**

Образовательная программа: 22.03.01 Материаловедение и технологии материалов, профиль:  
Материаловедение и технологии машиностроительных материалов

## 1. Обобщенная структура фонда оценочных средств дисциплины

Обобщенная структура фонда оценочных средств по дисциплине Молекулярная динамика представлена в Таблице. Совокупность результатов обучения по дисциплине соотнесена с уровнями сформированности компетенций и соотнесенными с ними индикаторами. Индикаторы достижения компетенций измеряемы с помощью средств текущей и промежуточной аттестации по дисциплине Молекулярная динамика.

Таблица

Формируемые компетенции	Индикаторы компетенций	Темы	Этапы оценки результатов обучения и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций	
			Мероприятия текущего контроля (контрольная работа, курсовой проект, РГЗ(Р), реферат и др.)	Промежуточная аттестация (экзамен, зачет)
ОПК-4 Способен проводить измерения и наблюдения в сфере профессиональной деятельности, обрабатывать и представлять экспериментальные данные	1. Составляет отчеты по учебно-исследовательской деятельности, включая анализ экспериментальных результатов, сопоставления их с известными аналогами	Знакомство с LAMMPS и программами для визуализации результатов симуляции Исследование дислокационной структуры кристаллов Моделирование диффузии междоузельных атомов и вакансий в кристалле Моделирование процесса деформации и последующего нагрева кристалла Моделирование процесса деформации кристалла Моделирование процесса нагрева и охлаждения кристалла Обработка результатов измерений с использованием языка программирования Python Система мягких дисков	РГЗ	Зачет
ОПК-8 Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	2. Умеет применять современные информационно-коммуникационные технологии и программные средства для решения задач профессиональной деятельности с соблюдением норм информационной безопасности	Знакомство с LAMMPS и программами для визуализации результатов симуляции Исследование дислокационной структуры кристаллов Моделирование диффузии междоузельных атомов и вакансий в кристалле Моделирование процесса деформации и последующего нагрева кристалла Моделирование процесса деформации кристалла Моделирование процесса нагрева и охлаждения кристалла Обработка результатов измерений с использованием языка программирования Python Система мягких дисков	РГЗ	Зачет
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации,	1. Знает принципы сбора, отбора и обобщения информации.	Дефекты в материалах. Вакансии, дислокации, границы зёрен Примеры исследований с использованием молекулярной динамики Симуляция	РГЗ	Зачет

применять системный подход для решения поставленных задач		превращений в процессе деформации и нагрева Современные приложения для молекулярной динамики. LAMMPS Структура твердых тел, жидкостей и газов. Функция радиального распределения. Полиэдры Вороного. Уравнения движения. Потенциалы межатомного взаимодействия		
---	--	---	--	--

## 2. Методика оценки этапов формирования компетенций по дисциплине

Результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с установленными в программе индикаторами достижения компетенций проверяются при проведении мероприятий текущей аттестации (контроля) в процессе изучения дисциплины, указанных в таблице раздела 1.

В 7 семестре обязательным этапом текущей аттестации является расчетно-графическое задание (работа) (РГЗ(Р)). Требования к выполнению РГЗ(Р), состав и правила оценки сформулированы в паспорте РГЗ(Р).

Промежуточная аттестация по **дисциплине** проводится в 7 семестре - в форме зачета, который направлен на оценку сформированности результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с установленными в программе индикаторами достижения компетенций ОПК-4, ОПК-8, УК-1 и соотнесенных с ними индикаторов. (см. таблицу раздела 1).

Зачет письменной форме, по билетам.

Общие правила выставления оценок текущей и промежуточной аттестации по дисциплине определяются балльно-рейтинговой системой, приведенной в рабочей программе дисциплины.

На основании критериев, приведенных в п. 3, осуществляется оценка уровней достигнутых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в программе индикаторами достижения компетенций ОПК-4, ОПК-8, УК-1, закрепленных за дисциплиной

**Общая характеристика уровней результатов обучения, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций**

**Продвинутый.** Теоретическое содержание курса освоено полностью. Студент демонстрирует систематическое и глубокое понимание учебного материала и способность к самостоятельному пополнению и обновлению знаний в ходе дальнейшей учебной работы и профессиональной деятельности. Сформированы необходимые навыки практической работы. Все учебные задания, предусмотренные программой обучения, выполнены качественно, без замечаний. Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с установленными в программе индикаторами достижения компетенций, оценены числом баллов, входящим в диапазон продвинутого уровня.

**Базовый.** Теоретическое содержание курса освоено в объеме, необходимом для дальнейшей учебы и профессиональной деятельности. Навыки практической работы сформированы на базовом уровне. Все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены с небольшими погрешностями. Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с установленными в программе индикаторами достижения компетенций, оценены числом баллов в пределах базового уровня.

**Пороговый.** Теоретическое содержание курса освоено в объеме, необходимом для дальнейшей учебы и профессиональной деятельности. Некоторые практические навыки работы с

сформированы с пробелами. Учебные задания, предусмотренные программой обучения, выполнялись с ошибками, исправленными под руководством преподавателя. Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с установленными в программе индикаторами достижения компетенций, оценены числом баллов в пределах порогового уровня.

**Ниже порогового.** Теоретическое содержание курса освоено фрагментарно. Необходимые навыки практической работы сформированы минимально. Большинство учебных заданий, предусмотренных программой обучения, не выполнены. Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с установленными в программе индикаторами достижения компетенций, оценены числом баллов, входящих в диапазон ниже порогового уровня.

## Паспорт зачета

по дисциплине «Молекулярная динамика», 7 семестр

### 1. Методика оценки

Зачет проводится в письменной форме, по билетам. Билет состоит из 3 вопросов и 1 задачи и формируется по следующему правилу:

- вопросы посвящены материалу, полученному на лекциях;
- задача посвящена материалу, пройденному на практиках;

На зачете преподаватель вправе задавать студенту уточняющие и дополнительные вопросы из общего перечня.

### Форма билета для зачета

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
Факультет МТФ

Билет № \_\_\_\_\_

к зачету по дисциплине «Молекулярная динамика»

---

1. Потенциал Леннард-Джонса
2. Частичные дислокации
3. Провести моделирование процесса сжатия небольшого кристалла алюминия до деформации 0.5

Утверждаю: зав. кафедрой \_\_\_\_\_ должность, ФИО  
(подпись) (дата)

### 2. Критерии оценки результатов обучения, соотнесенных с уровнями освоения индикаторов достижения компетенций

Ответ на билет засчитывается на **продвинутом** уровне, если студент проводит сравнительный комплексный анализ материала, выявляет проблемы, предлагает механизмы их решения, представляет количественные характеристики определенных процессов, приводит конкретные примеры, не допускает ошибок и способен обосновать выбор метода решения задачи. Совокупность результатов обучения по дисциплине (модулю) и

соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций не содержит пробелов. Установленные в программе компетенции сформированы в полном объеме. Оценка составляет *от 35 до 40 баллов*.

Ответ на билет (тест) для зачета засчитывается на **базовом** уровне, если студент при ответе на вопросы формулирует основные понятия, дает характеристику процессов, явлений, проводит анализ причин, условий, способен представить количественные и качественные характеристики процессов, не допускает существенных ошибок при решении задачи (если задача предусмотрена). Совокупность результатов обучения по дисциплине (модулю) и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит несущественные пробелы. Установленные в программе компетенции сформированы на базовом уровне. Оценка составляет *от 34 до 27 баллов*.

Ответ на билет (тест) для зачета засчитывается на **пороговом** уровне, если студент при ответе на вопросы дает определение основных понятий, может показать причинно-следственные связи явлений, при решении задачи (если задача предусмотрена) допускает непринципиальные ошибки, например, вычислительные. Совокупность результатов обучения по дисциплине (модулю) и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит пробелы. Установленные в программе компетенции сформированы на пороговом уровне. Оценка составляет *от 26 до 20 баллов*.

Ответ на билет (тест) для зачета считается **неудовлетворительным** (ниже порогового уровня), если студент при ответе на вопросы не дает определений основных понятий, не способен показать причинно-следственные связи явлений, при решении задачи (если задача предусмотрена) допускает принципиальные ошибки. Совокупность результатов обучения по дисциплине (модулю) и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит существенные пробелы. Установленные в программе компетенции не сформированы. Оценка составляет *менее 20 баллов*.

### 3. Шкала оценки

Зачет считается сданным, если сумма баллов по всем заданиям билета составляет от 10 до 20 баллов включительно. Сумма менее 10 баллов признается неудовлетворительным результатом промежуточной аттестации по дисциплине (модулю).

В общей оценке по дисциплине баллы за зачет учитываются в соответствии с правилами балльно-рейтинговой системы, установленными в НГТУ.

## **Паспорт расчетно-графического задания (работы)**

по дисциплине «Молекулярная динамика», 7 семестр

### **1. Методика оценки**

Выполнение расчетно-графического задания (работы) (далее - РГЗ(Р)) является формой текущей аттестации (контроля) по дисциплине, предусмотренной учебным планом.

Цель РГЗ(Р): научиться использовать метод молекулярной динамики для решения задач материаловедения.

Обязательным элементом РГЗ(Р) являются решение задач, связанных с тепловым и деформационным воздействием на кристаллические материалы

РГЗ(Р) выполняется индивидуально.

Преподаватель осуществляет руководство по выполнению задания, оказывает консультационную помощь и принимает отчет по РГЗ(Р).

По результатам выполнения РГЗ(Р) выполняется отчет, который состоит из следующих частей:

1. Титульный лист (см. ниже)
2. Описание задания
3. Постановка эксперимента
4. Описание результатов
5. Выводы
6. Список литературы и источников

*Требования к оформлению:*

Объем РГЗ(Р) до 20 страниц машинописного текста формата А4. Шрифт Times New Roman, 12. Формулы набираются в редакторе Math Type. Размещение сканированных формул не допускается. Нумерация страниц сквозная, в нижней части листа по центру арабскими цифрами. Работа должна быть отредактирована, не содержать орфографических, синтаксических и стилевых ошибок.

Отчет в установленные сроки сдается на кафедру для проверки. Преподаватель оценивает качество работы, отмечает положительные стороны и недостатки работы и определяет, допускается ли она к защите. При необходимости преподаватель возвращает РГЗ(Р) студенту для доработки и устанавливает сроки повторного предоставления для проверки. До защиты работы студентом должны быть сделаны необходимые исправления и дополнения по всем замечаниям преподавателя.

При положительном результате оценивания РГЗ(Р) студент её распечатывает, передает на кафедру и защищает до сессии в назначенное преподавателем время.

Защита РГЗ(Р) состоит в индивидуальном устном собеседовании студента с преподавателем. В процессе защиты выявляется уровень знаний студента, степень его самостоятельности при выполнении работы. По результатам защиты студенту выставляется оценка в соответствии с критериями, приведенными в п. 2 настоящего Паспорта.

### **2. Критерии оценки результатов обучения, соотнесенных с уровнями освоения**

## **индикаторов достижения компетенций**

Общие правила выставления оценок текущей аттестации определяются балльно-рейтинговой системой, установленной локальным актом НГТУ.

РГЗ(Р) считается выполненной **на продвинутом** уровне, если все необходимые расчеты произведены самостоятельно и без ошибок; все разделы РГЗ(Р) выполнены правильно и в полном объеме; работа оформлена в соответствии с требованиями; сдана преподавателю в указанные сроки и не возвращалась для доработки; даны полные и развернутые выводы и рекомендации; на защите студентом даны уверенные и аргументированные ответы. Совокупность запланированных результатов и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций не содержит пробелов. Закрепленные за РГЗ(Р) компетенции сформированы на продвинутом уровне. Оценка составляет *от 28 до 30 баллов*.

РГЗ(Р) считается выполненной **на базовом** уровне, если все необходимые расчеты произведены самостоятельно и без существенных ошибок; все разделы РГЗ(Р) выполнены правильно, но есть замечания к полноте предоставления информации; работа оформлена в соответствии с требованиями; сдана преподавателю в указанные сроки и однократно возвращалась студенту для незначительной доработки; в заключении даны выводы и рекомендации; на защите студентом допущены непринципиальные ошибки. Совокупность запланированных результатов и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит несущественные пробелы. Закрепленные за РГЗ(Р) компетенции сформированы на базовом уровне. Оценка составляет *от 20 до 28 баллов*.

РГЗ(Р) считается выполненной **на пороговом** уровне, если все необходимые расчеты произведены самостоятельно, но с ошибками, часть из которых носит принципиальный характер; есть замечания к полноте предоставления информации; работа оформлена в соответствии с требованиями; сдана преподавателю, но неоднократно возвращалась студенту для доработки; в заключении даны краткие выводы; защита РГЗ(Р) вызывает у студента серьезные затруднения. Совокупность запланированных результатов и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит существенные пробелы. Закрепленные за РГЗ(Р) компетенции сформированы на пороговом уровне. Оценка составляет *от 10 до 20 баллов*.

РГЗ(Р) считается **не выполненной** (ниже порогового уровня), если расчеты произведены с серьезными ошибками; есть замечания к полноте предоставления информации и оформлению; РГЗ(Р) была сдана преподавателю, но неоднократно возвращалась студенту для доработки, что не привело к улучшению ее качества; РГЗ(Р) не допущена до защиты, что свидетельствует о неудовлетворительном уровне достигнутых студентом результатов. Совокупность запланированных результатов и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит множественные существенные пробелы. Закрепленные за РГЗ(Р) компетенции не сформированы. Оценка составляет менее 10 баллов.

### **3. Шкала оценки**

В общей оценке по дисциплине баллы за РГЗ(Р) учитываются в соответствии с правилами балльно-рейтинговой системы, приведенными в рабочей программе дисциплины.

РГЗ(Р) как форма текущей аттестации (контроля) по дисциплине считается успешно выполненной, если сумма полученных баллов по всем его заданиям составляет от 10 до 30 баллов включительно.

### **4. Примерный перечень тем РГЗ(Р)**



1. Деформация алюминиевых сплавов
2. Плавление и закалка титановых сплавов
3. Диффузия вакансий в железе
4. Эволюция дислокационной структуры при деформации и нагреве металлических материалов