

**Тематический план лекций к курсу
«Мультимасштабное моделирование процессов в элементах
электронных устройств»
1 семестр, 36 часов
Магистратура 011800 «Радиофизика»**

№	Тема	Количество часов
1	Атомистическое моделирование Эмпирические методы (метод атом-атомных потенциалов, метод Терсоффа-Бреннера и другие). Полуэмпирические методы (метод сильной связи, РМЗ и другие). Неэмпирические методы.	8
2	Компьютерное моделирование молекулярной динамики Модель цепи с флуктуирующей длиной связей. Моделирование в расширенном ансамбле в четырехмерном пространстве. Компьютерное моделирование одиночной жесткоцепной макромолекулы. Методы измерения давления в решеточных моделях Монте-Карло для расчета уравнения состояния полимерного раствора. Компьютерное моделирование макромолекул. Учет влияния внешней среды. Термостаты.	4
3	Мультимасштабное моделирование Сокращение степеней свободы при мультимасштабном моделировании. Обратный метод Монте-Карло: восстановление потенциала взаимодействия по известной функции радиального распределения. Вычисление атом-атомных эффективных потенциалов из данных ab initio моделирования. Вычисление эффективных потенциалов при неявном описании. Эффективные потенциалы для упрощенной модели сложной системы (биосистемы, наноэмиттера, нанокompозита). Применение для моделирования морфологических свойств поверхностей. Концепция гибридной молекулярно-динамической модели ММ/QM (молекулярно-механическая модель / квантовая модель).	6
4	Молекулярный дизайн нано- и мезоструктур на основе углеродных нанобъектов Материалы и методы. Нанотрубки, фуллерены, графен. Ван-дер-ваальсовы сферы. Композитные материалы. Динамика абсорбции молекул нанотрубкой. Армирование нанотрубками керамических материалов, биологических материалов (хитозана и других), материала автоэмиссионного катода пониженной работы выхода.	4
5	Моделирование нано- и мезоструктур во внешних полях Современные подходы моделирования наноматериалов и композитов во внешних полях. Основы теории электрических диполей на химических связях. Поляризуемость.	4
6	Моделирование деформирования наноматериалов и композитов Структурная модель наноматериалов и композитов. Некоторые известные результаты моделирования и их обсуждение. Континуальная модель. Модель стержней. Размерные эффекты. Молекулярное моделирование процессов деформаций и разрушения. Проблемы фиксирования момента начала разрушения: анализ спиновой заселенности, распределение локальных напряжений	10

	атомной сетки. Закономерности деформирования и разрушения КОМПОЗИТОВ.	
--	--	--