

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Оренбургский государственный университет»

Кафедра радиофизики и электроники

Н.Ю. Кручинин

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД В ПРОБЛЕМЕ
ОПИСАНИЯ КОНФОРМАЦИОННЫХ ПЕРЕСТРОЕК
МАКРОЦЕПНЫХ СТРУКТУР**

Рекомендовано к изданию Редакционно-издательским советом
федерального государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего профессионального образования
«Оренбургский государственный университет» в качестве
методических указаний для студентов, обучающихся по
программам высшего профессионального образования по
направлениям подготовки 011800.62 Радиофизика и
011200.62 Физика

Оренбург
2014

УДК 538(9)
ББК 22.37
К 84

Рецензент – кандидат физико-математических наук В.В. Гуньков

Кручинин, Н.Ю.

К 84 Молекулярно-динамический подход в проблеме описания конформационных перестроек макроцепных структур: методические указания к лабораторным работам / Н.Ю. Кручинин. – Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ОГУ, 2014. – 68 с.

Методические указания содержат 5 лабораторных работ и методические указания к ним. Каждая работа включает теоретическое изложение материала, постановку задачи, порядок выполнения.

Методические указания предназначены для студентов направления 011800.62 «Радиофизика» и 011200.62 «Физика» для изучения дисциплины «Вычислительная физика».

УДК 538(9)
ББК 22.37

© Кручинин Н.Ю., 2014
© ОГУ, 2014

Содержание

	Введение.....	4
1	Молекулярно-динамический подход в проблеме описания конформационных перестроек макроцепных структур.....	5
2	Лабораторные работы.....	22
2.1	Лабораторная работа №1. Распределение плотности звеньев полимерной цепи на плоских кристаллических поверхностях адсорбентов.....	22
2.2	Лабораторная работа №2. Распределение плотности звеньев полимерной цепи внутри цилиндрической нанопоры.....	33
2.3	Лабораторная работа №3. Распределение плотности звеньев полимерной цепи в полости пористого адсорбента.....	42
2.4	Лабораторная работа №4. Распределение плотности звеньев полимерной цепи на поверхности дисперсной наночастицы.....	47
2.5	Лабораторная работа №5. Адсорбция полипептидов на углеродных нанотрубках.....	58
	Список использованных источников	66