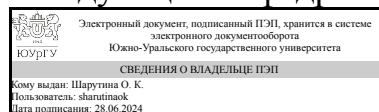


УТВЕРЖДАЮ  
Заведующий кафедрой



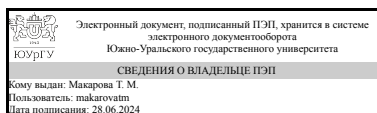
О. К. Шарутина

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА практики

**Практика** Производственная практика (научно-исследовательская работа)  
для направления 04.04.01 Химия  
**Уровень** Магистратура **форма обучения** очная  
**кафедра-разработчик** Теоретическая и прикладная химия

Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

Разработчик программы,  
к.хим.н., доцент



Т. М. Макарова

# 1. Общая характеристика

## Вид практики

Производственная

## Тип практики

научно-исследовательская работа

## Форма проведения

Дискретно по видам практик

## Цель практики

Целью практики является получения навыков применять различные языки программирования для написания собственных программ для обработки структурированных текстовых и количественных данных для задач моделирования атомно-молекулярных систем

## Задачи практики

Задачами практики являются:

- 1) Написание плана выполнения процедур для молекулярно-динамического моделирования системы
- 2) Знакомство с языком скриптования bash
- 3) Знакомство с языком потоковой обработки данных awk
- 4) Знакомство с возможностями языка Python по управлению процессами

## Краткое содержание практики

Практика проходит в рамках программы проектного обучения "На пути к цифровым двойникам химических соединений и материалов", рассчитанного на 2 года магистратуры. В рамках дисциплины студенты учатся планировать молекулярно-динамические расчеты и писать собственные алгоритмы и ПО для их осуществления.

## 2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате прохождения практики

Планируемые результаты освоения ОП ВО	Планируемые результаты обучения при прохождении практики
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	Знает:способы планирования ресурсов, в том числе с учетом их заменяемости, необходимых для успешной реализации проекта НИР в рамках производственной практики Умеет:разрабатывать концепцию проекта

	НИР в рамках производственной практики: формулирует цель, задачи, обосновывает актуальность, значимость, ожидаемые результаты и возможные сферы их применения
<p>ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения</p>	Имеет практический опыт: разработки и реализации концепции проекта НИР в рамках производственной практики
<p>ОПК-2 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук</p>	<p>Знает: теоретические основы экспериментальных и расчетно-теоретических методов исследования в области выбранной тематики НИР, современные приборы, программное обеспечение и базы данных, использование которых необходимо в области выбранной тематики НИР, правила техники безопасности при работе в химической лаборатории</p>
	<p>Умеет: применять необходимые экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования для решения поставленных задач в рамках выполнения НИР</p>
	<p>Имеет практический опыт: поиска и сбора информации, работы со справочной, специальной и научной литературой в области выбранной тематики НИР, проведения экспериментальных и расчетно-теоретических работ в в рамках выполнения НИР с использованием современных методов, приборов, программного обеспечения и баз данных</p>
	<p>Знает: способы проведения критического анализа и обобщения результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических исследований, выполненных в рамках НИР</p>
	<p>Умеет: самостоятельно корректно интерпретировать и логически обобщать результаты собственных экспериментальных и расчетно-теоретических исследований, выполненных в рамках НИР</p>
	<p>Имеет практический опыт: конструктивного обсуждения результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических исследований,</p>

	выполненных в рамках НИР, с руководителем практики
ОПК-4 Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов	Знает:
	Умеет: оформлять результаты НИР в форме отчета по производственной (НИР) практике и научных публикаций (статей, тезисов докладов)
	Имеет практический опыт: ведения научных дискуссий, не нарушая законов логики и правил аргументирования

### 3. Место практики в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ	Перечень последующих дисциплин, видов работ
1.О.01 Иностранный язык в профессиональной деятельности ФД.02 Патентование 1.О.07 Теория химической связи: введение в расчетные методы Учебная практика (ознакомительная) (1 семестр)	1.О.05 Актуальные задачи современной химии Производственная практика (научно-исследовательская работа) (3 семестр)

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым для прохождения данной практики и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
1.О.07 Теория химической связи: введение в расчетные методы	Знает: классификацию химических связей, основные свойства химических связей и их характеристики внутри классов Умеет: выполнять типовые квантово-химические расчеты (включая оптимизацию геометрии молекул методами теории функционала плотности), использовать расчетную волновую функцию для описания свойств химических связей на основе специализированного программного обеспечения Имеет практический опыт: поиска отличительных особенностей химических связей в многокомпонентных системах, интерпретации результатов расчетов и моделирования для объяснения направления реакций и реакционной способности молекул
1.О.01 Иностранный язык в профессиональной деятельности	Знает: особенности построения академического текста и научных публикаций Умеет: ставить задачи профессиональной деятельности и в процессе дискуссий находить

	<p>подходы к их решению</p> <p>Имеет практический опыт: делового и профессионального общения и выступления с научными и научно-популярными докладами на изучаемом иностранном языке</p>
ФД.02 Патентоведение	<p>Знает: требования стандартов на составление и оформление патентов, научно-технических отчетов, обзоров, публикаций, рецензий</p> <p>Умеет: осуществлять патентные поиски, оформлять заявки на регистрацию интеллектуальной собственности</p> <p>Имеет практический опыт: приведения в соответствие требованиям и нормам стандартов разработанной документации, формирования и оформления отчетов, с соблюдением требований ГОСТ</p>
Учебная практика (ознакомительная) (1 семестр)	<p>Знает: предмет, основные термины и понятия, базовые методы теоретических и/или экспериментальных исследований, использующиеся в области выбранной тематики в рамках учебной практики (ознакомительной практики), правила техники безопасности при работе в химической лаборатории, современные подходы к поиску научной литературы и информации по заданной тематике в рамках учебной практики (ознакомительной практики) с использованием новейших и традиционных средств информации (сеть Интернет, специализированные информационные базы данных, химические периодические издания, реферативные журналы и др.)</p> <p>Умеет: проводить первичный анализ результатов исследования по сформулированной тематике в рамках учебной практики (ознакомительной практики) и их конструктивного обсуждения с руководителем практики, проводить систематизацию и анализ научной литературы по заданной тематике в рамках учебной практики (ознакомительной практики)</p> <p>Имеет практический опыт: проведения базовых (ознакомительных) исследований по сформулированной тематике согласно календарному плану учебной практики (ознакомительной практики), согласованному с руководителем практики, и оформления результатов исследования в форме отчета по учебной практике (ознакомительной практике), оформления результатов поиска и анализа научной</p>

литературы по заданной тематике в форме отчета по учебной практике (ознакомительной практике)

#### 4. Объем практики

Общая трудоемкость практики составляет зачетных единиц 6, часов 216, недель 16.

#### 5. Структура и содержание практики

№ раздела (этапа)	Наименование или краткое содержание вида работ на практике	Кол-во часов
1	Подготовка плана работы над задачей молекулярно-механического моделирования	60
2	Разработка алгоритмов и скриптов для выполнения отдельных задач молекулярно-механического моделирования	76
3	Написание итогового скрипта для выполнения всей процедуры молекулярно-динамического моделирования и написание отчета по практике	80

#### 6. Формы отчетности по практике

По окончании практики, студент предоставляет на кафедру пакет документов, который включает в себя:

- дневник прохождения практики, включая индивидуальное задание и характеристику работы практиканта организацией;
- отчет о прохождении практики.

Формы документов утверждены распоряжением заведующего кафедрой от 20.02.2017 №10.

#### 7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации обучающихся по практике

Вид промежуточной аттестации – дифференцированный зачет. Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

##### 7.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Семестр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс.балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	2	Текущий контроль	Скрипт awk для обработки структурного файла	1	5	5 баллов -- программа составлена верно и обрабатывает файл согласно	дифференцированный зачет

						поставленной задаче. За каждую ошибку, искажающую результат работы программы, снимается по 1 баллу.	
2	2	Текущий контроль	Написание скрипта bash для запуска процесса отверждения полимера	1	5	5 баллов -- программа составлена верно и обрабатывает файл согласно поставленной задаче. За каждую ошибку, искажающую результат работы программы, снимается по 1 баллу.	дифференцированный зачет
3	2	Текущий контроль	Программа Python для распределенного выполнения процессов молекулярного моделирования	1	5	5 баллов -- программа составлена верно и обрабатывает файл согласно поставленной задаче. За каждую ошибку, искажающую результат работы программы, снимается по 1 баллу.	дифференцированный зачет
4	2	Промежуточная аттестация	Отчет по учебной практике	-	5	Критерии оценки: 5 баллов: Задание на практику выполнено полностью. Отчет оформлен в соответствии с требованиями, верно указаны все параметры оборудования,	дифференцированный зачет

					с которыми студент ознакомлен. 4 балла: Задание на практику выполнено полностью. Отчет содержит некоторые ошибки или неточности в представлении результата. 3 балла: Задание на практику выполнено не полностью, либо в значительной части отсутствует в отчете. Не заполнены или неправильно заполнены целые разделы отчета. 2 балла: Задание на практику не выполнено. Отчет отсутствует.	
--	--	--	--	--	---	--

## 7.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Промежуточная аттестация (дифференцированный зачет) происходит в виде написания отчета по учебной практике. Суммарный рейтинг, в соответствии с которым выставляется оценка, на 60% состоит из баллов за задания текущего контроля и на 40% - из оценки за предоставленный отчет.

## 7.3. Оценочные материалы

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ			
		1	2	3	4
УК-2	Знает: способы планирования ресурсов, в том числе с учетом их заменяемости, необходимых для успешной реализации проекта НИР в рамках производственной практики				+
УК-2	Умеет: разрабатывать концепцию проекта НИР в рамках производственной практики: формулирует цель, задачи, обосновывает актуальность, значимость, ожидаемые результаты и возможные сферы их применения				+
УК-2	Имеет практический опыт: разработки и реализации концепции проекта НИР в рамках производственной практики				+



ОПК-1	Знает: теоретические основы экспериментальных и расчетно-теоретических методов исследования в области выбранной тематики НИР, современные приборы, программное обеспечение и базы данных, использование которых необходимо в области выбранной тематики НИР, правила техники безопасности при работе в химической лаборатории				+	+
ОПК-1	Умеет: применять необходимые экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования для решения поставленных задач в рамках выполнения НИР				+	+
ОПК-1	Имеет практический опыт: поиска и сбора информации, работы со справочной, специальной и научной литературой в области выбранной тематики НИР, проведения экспериментальных и расчетно-теоретических работ в в рамках выполнения НИР с использованием современных методов, приборов, программного обеспечения и баз данных				+	+
ОПК-2	Знает: способы проведения критического анализа и обобщения результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических исследований, выполненных в рамках НИР				+	+
ОПК-2	Умеет: самостоятельно корректно интерпретировать и логически обобщать результаты собственных экспериментальных и расчетно-теоретических исследований, выполненных в рамках НИР				+	++
ОПК-2	Имеет практический опыт: конструктивного обсуждения результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических исследований, выполненных в рамках НИР, с руководителем практики				+	++
ОПК-4	Умеет: оформлять результаты НИР в форме отчета по производственной (НИР) практике и научных публикаций (статей, тезисов докладов)					++
ОПК-4	Имеет практический опыт: ведения научных дискуссий, не нарушая законов логики и правил аргументирования					++

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение практики

### Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

Не предусмотрена

б) дополнительная литература:

Не предусмотрена

из них методические указания для самостоятельной работы студента:

1. Д.Б.Слоуз, А.Д. Роббинс и др. Справочник по АWK

### Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная	Златопольский, Д. М. Основы программирования на языке Python / Д. М. Златопольский. — 2-ое изд., испр. и доп. —

		система издательства Лань	Москва : ДМК Пресс, 2018. — 396 с. — ISBN 978-5-97060-641-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/131683">https://e.lanbook.com/book/131683</a>
2	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Маккинни, У. Python и анализ данных / У. Маккинни ; перевод с английского А. А. Слинкина. — 2-ое изд., испр. и доп. — Москва : ДМК Пресс, 2020. — 540 с. — ISBN 978-5-97060-590-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/131721">https://e.lanbook.com/book/131721</a>

## 9. Информационные технологии, используемые при проведении практики

Перечень используемого программного обеспечения:

1. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)"-Портал "Электронный ЮУрГУ" (<https://edu.susu.ru>)(бессрочно)
2. -Python(бессрочно)

Перечень используемых информационных справочных систем:

Нет

## 10. Материально-техническое обеспечение практики

Место прохождения практики	Адрес места прохождения	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, обеспечивающие прохождение практики
Научно-образовательный центр "Нанотехнологии" ЮУрГУ	454080, Челябинск, Ленина, 76	Локальный вычислительный комплекс на процессорах CPU Intel Xeon E5-2697, персональные компьютеры, проектор