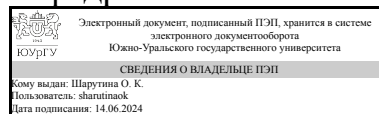


УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей
кафедрой



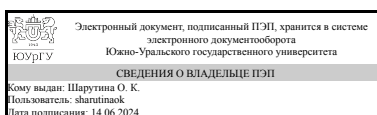
О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.М1.02 Моделирование свойств многокомпонентных материалов:
проектное обучение
для направления 04.04.01 Химия
уровень Магистратура
магистерская программа Хемоинформатика
форма обучения очная
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

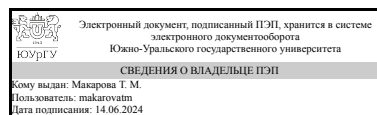
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

Зав.кафедрой разработчика,
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,
к.хим.н., доцент



Т. М. Макарова

1. Цели и задачи дисциплины

Целью дисциплины является более глубокое освоение студентом навыков молекулярного моделирования и применения его ко многокомпонентным материалам. В рамках этой цели дисциплина выполняет следующие задачи: 1. Подбор, корректировка силовых полей и методики моделирования для конкретной системы, изучаемой в рамках проекта 2. Валидация выбранных моделей, расчет экспериментально известных свойств изучаемой системы 3. Расчет интересующих свойств системы, построение модели зависимости свойств от структуры изучаемых многокомпонентных материалов.

Краткое содержание дисциплины

Дисциплина изучается в рамках программы проектного обучения "Моделирование структуры и свойств кристаллических и гибридных наноматериалов", рассчитанного на 2 года магистратуры. В рамках дисциплины студентам с высокой долей самостоятельности погружается в работу с различными методами молекулярно-динамического моделирования, расчета физико-химических свойств и экспериментальную проверку расчетов.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

| Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции) | Планируемые результаты обучения по дисциплине |
|---|---|
| ПК-7 Способен к оценке и прогнозированию физико-химических свойств, биологической активности, реакционной способности атомно-молекулярных систем и их верификации | Знает: Методы и подходы для расчетов физико-химических свойств, показателей биологической активности, оценки реакционной способности химических соединений Умеет: Обрабатывать результаты расчетов молекулярного моделирования и извлекать из них данные о свойствах химических соединений и материалов Имеет практический опыт: Планирования этапов молекулярного моделирования в соответствии с целью предсказания свойств химических соединений и материалов |

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

| Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана | Перечень последующих дисциплин, видов работ |
|---|---|
| Нет | Производственная практика (преддипломная) (4 семестр) |

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Нет

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 з.е., 288 ч., 80,5 ч. контактной работы

| Вид учебной работы | Всего часов | Распределение по семестрам в часах | |
|--|-------------|------------------------------------|--|
| | | Номер семестра | |
| | | 3 | |
| Общая трудоёмкость дисциплины | 288 | 288 | |
| <i>Аудиторные занятия:</i> | 64 | 64 | |
| Лекции (Л) | 0 | 0 | |
| Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ) | 0 | 0 | |
| Лабораторные работы (ЛР) | 64 | 64 | |
| <i>Самостоятельная работа (СРС)</i> | 207,5 | 207,5 | |
| Подготовка к контрольному мероприятию №3 | 40 | 40 | |
| Подготовка к контрольному мероприятию №4 | 40 | 40 | |
| Подготовка к экзамену за III семестр | 47,5 | 47,5 | |
| Подготовка к контрольному мероприятию №1 | 20 | 20 | |
| Подготовка к контрольному мероприятию №5 | 40 | 40 | |
| Подготовка к контрольному мероприятию №2 | 20 | 20 | |
| Консультации и промежуточная аттестация | 16,5 | 16,5 | |
| Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен) | - | экзамен | |

5. Содержание дисциплины

| № раздела | Наименование разделов дисциплины | Объем аудиторных занятий по видам в часах | | | |
|-----------|--|---|---|----|----|
| | | Всего | Л | ПЗ | ЛР |
| 1 | Подбор режима моделирования для расчета физико-химических свойств | 18 | 0 | 0 | 18 |
| 2 | Расчет физико-химических свойств модели многокомпонентного материала | 24 | 0 | 0 | 24 |
| 3 | Валидация модели многокомпонентного материала, коррекция молекулярно-динамической модели | 22 | 0 | 0 | 22 |

5.1. Лекции

Не предусмотрены

5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

5.3. Лабораторные работы

| № занятия | № раздела | Наименование или краткое содержание лабораторной работы | Кол-во часов |
|-----------|-----------|---|--------------|
|-----------|-----------|---|--------------|

| | | | |
|----|---|--|---|
| 1 | 1 | Подбор физико-химических свойств для моделирования | 6 |
| 2 | 1 | Выбор методики моделирования физико-химических свойств | 6 |
| 3 | 1 | Подбор оптимального режима для моделирования физико-химических свойств многокомпонентного материала | 6 |
| 4 | 2 | Написание ПО для моделирования физико-химических свойств | 6 |
| 5 | 2 | Отладка процедуры молекулярной динамики для расчета физико-химических свойств материалов | 6 |
| 6 | 2 | Анализ полученных результатов в зависимости от условий и процедур молекулярной динамики | 6 |
| 7 | 2 | Доработка условий молекулярно-динамического моделирования | 6 |
| 8 | 3 | Написание ПО для анализа полученных результатов молекулярно-динамического моделирования | 6 |
| 9 | 3 | Визуализация и систематизация полученных результатов | 6 |
| 10 | 3 | Сравнение рассчитанных физико-химических свойств с экспериментальными | 4 |
| 11 | 3 | Внесение предложений по изменению в модель многокомпонентного материала для улучшения воспроизводимости экспериментальных данных | 6 |

5.4. Самостоятельная работа студента

| Выполнение СРС | | |
|--|---|---------|
| Подвид СРС | Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс | Семестр |
| Подготовка к контрольному мероприятию №3 | Х.-Д. Хельтье и др. Молекулярное моделирование : теория и практика, гл. 4 | |
| Подготовка к контрольному мероприятию №4 | Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров", гл 20-22; "Gromacs: справочный мануал, версия 5.1.5", гл. 4 | |
| Подготовка к экзамену за III семестр | Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл. 1-3; Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров", гл 18-23 | |
| Подготовка к контрольному мероприятию №1 | https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6339001/mod_resource/content/1/lecture_5_organized.pdf ; Х.-Д. Хельтье и др. Молекулярное моделирование : теория и практика, гл. 2.3-2.4 | |
| Подготовка к контрольному мероприятию №5 | Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров", гл 23; База данных Scopus | |
| Подготовка к контрольному мероприятию №2 | https://edu.susu.ru/pluginfile.php/5979399/mod_resource/content/1/lecture_4.pdf ; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл. 2 | |

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

| № КМ | Се-местр | Вид контроля | Название контрольного мероприятия | Вес | Макс. балл | Порядок начисления баллов | Учитывается в ПА |
|------|----------|------------------|---|-----|------------|---|------------------|
| 1 | 3 | Текущий контроль | Тест «Оптимизация геометрии» | 1 | 5 | <p>За каждый вопрос начисляется от 0 до 1 балла, в зависимости от степени правильности ответа.</p> <p>1 балл - полностью правильный ответ на вопрос.</p> <p>В случае вопроса со множественным выбором возможна дробная оценка, когда начисляется по 1/n баллов за каждый выбранный вариант из n правильных, и снимается 1/m баллов за каждый выбранный вариант из m неправильных.</p> | экзамен |
| 2 | 3 | Текущий контроль | Тест «Управление молекулярной динамикой» | 1 | 7 | <p>За каждый вопрос начисляется от 0 до 1 балла, в зависимости от степени правильности ответа.</p> <p>1 балл - полностью правильный ответ на вопрос.</p> <p>В случае вопроса со множественным выбором возможна дробная оценка, когда начисляется по 1/n баллов за каждый выбранный вариант из n правильных, и снимается 1/m баллов за каждый выбранный вариант из m неправильных.</p> | экзамен |
| 3 | 3 | Текущий контроль | Индивидуальное задание в рамках проекта по соотношению структура-свойства | 1 | 5 | <p>3 балла -- задание выполнено полностью, правильно и в срок. По 0,5 баллов снимается за каждую ошибку в исполнении, искажающую конечный результат или за каждую неделю задержки.</p> <p>2 балла -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.</p> | экзамен |
| 4 | 3 | Текущий контроль | Индивидуальное задание в рамках проекта по подбору силового поля или параметров | 1 | 5 | <p>3 балла -- задание выполнено полностью, правильно и в срок. По 0,5 баллов снимается за каждую ошибку в исполнении, искажающую конечный результат или за каждую</p> | экзамен |

| | | | | | | | |
|---|---|--------------------------|--|---|----|---|---------|
| | | | молекулярной динамики | | | неделю задержки. 2 балла -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами. | |
| 5 | 3 | Текущий контроль | Индивидуальное задание в рамках проекта по расчету свойств | 1 | 5 | Оценка складывается из составляющих: 3 балла -- задание выполнено полностью, правильно и в срок. По 0,5 баллов снимается за каждую ошибку в исполнении, искажающую конечный результат или за каждую неделю задержки. 2 балла -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами. | экзамен |
| 6 | 3 | Промежуточная аттестация | Экзамен за III семестр | - | 10 | Оценка за экзамен состоит из 5 баллов за презентацию и 5 баллов -- за доклад и ответы на вопросы. 5 баллов за презентацию состоят из: 1 балла -- за наличие всех разделов в презентации (введения, целей и задач, результатов, выводов, планов на будущее), чье содержание соответствует теме проекта и областью работы каждого студента над индивидуальной задачей в проекте 2 балла -- за полное и достоверное представление результатов, корректные выводы из них 1 балл -- за графическую составляющую, корректные, аккуратные и читаемые графики и схемы, а также общее расположение элементов презентации 1 балл -- за полную информацию о процедурах и условиях моделирования в каждом конкретном действии, представленную на основных или же дополнительных слайдах 5 баллов -- за доклад и ответы на вопросы состоят, в свою очередь, из: 1 балл -- доклад изложен за | экзамен |

| | | | | | |
|--|--|--|--|--|--|
| | | | | | <p>отведенное время, четко, последовательно, без крупных запинок.</p> <p>1 балл -- в докладе полно и достоверно изложены цели, задачи, результаты и выводы, соответствующие индивидуальной задаче студента в проекте; содержание презентации полностью соответствует докладу</p> <p>3 балла -- ответы на дополнительные вопросы.</p> |
|--|--|--|--|--|--|

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

| Вид промежуточной аттестации | Процедура проведения | Критерии оценивания |
|------------------------------|---|---|
| экзамен | Оценивание учебной деятельности по дисциплине происходит на основании полученных баллов за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля. Для повышения своего рейтинга студент вправе пройти процедуру экзамена. Экзамен проводится в форме презентации студентом результатов своей работы по проекту (изучение свойств построенной молекулярно-механической модели многокомпонентной системы и ее верификация) и ответа им на дополнительные вопросы, в т. ч. по теории молекулярного моделирования. | В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения |

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

| Компетенции | Результаты обучения | № КМ | | | | | |
|-------------|--|------|---|---|---|---|---|
| | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| ПК-7 | Знает: Методы и подходы для расчетов физико-химических свойств, показателей биологической активности, оценки реакционной способности химических соединений | + | + | | | | + |
| ПК-7 | Умеет: Обрабатывать результаты расчетов молекулярного моделирования и извлекать из них данные о свойствах химических соединений и материалов | | | + | + | + | + |
| ПК-7 | Имеет практический опыт: Планирования этапов молекулярного моделирования в соответствии с целью предсказания свойств химических соединений и материалов | | | + | + | | + |

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Физическая химия Кн. 1 Структура вещества. Термодинамика Учеб. для вузов: В 2 кн. К. С. Краснов, Н. К. Воробьев, И. Н. Годнев и др.; Под ред. К. С. Краснова. - 3-е изд., испр. - М.: Высшая школа, 2001. - 512,[1] с. ил.

б) дополнительная литература:

1. Владимиров, В. С. Уравнения математической физики [Текст] Учеб. для вузов В. С. Владимиров, В. В. Жаринов. - М.: Физико-математическая литература: Лаборатория базовы, 2000
2. Фейнман, Р. Ф. Фейнмановские лекции по физике [Текст] Вып. 8-9 Квантовая механика учеб. пособие : в 9 вып. Р. Ф. Фейнман, Р. Б. Лейтон, М. Сэндс ; пер. с англ. Г. И. Копылова ; под ред. Я. А. Смородинского. - Изд. 8-е. - М.: URSS : ЛИБРОКОМ, 2014. - 523, [1] с. ил.
3. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика Т. 3 Квантовая механика. Нерелятивистская теория В 10 т.: Учеб. пособие для физ. спец. ун-тов. - 4-е изд., испр. - М.: Наука, 1989. - 768 с.

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

Не предусмотрены

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров"
2. Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко Современные методы молекулярного моделирования
3. Шнейвайс А.Б. Азы GNUPLOTa
4. Gromacs: справочный мануал, версия 5.1.5

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров"
2. Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко Современные методы молекулярного моделирования
3. Шнейвайс А.Б. Азы GNUPLOTa
4. Gromacs: справочный мануал, версия 5.1.5

Электронная учебно-методическая документация

| № | Вид литературы | Наименование ресурса в электронной форме | Библиографическое описание |
|---|---------------------------|---|---|
| 1 | Дополнительная литература | Электронно-библиотечная система издательства Лань | Войтов, Н. М. Основы работы с Linux. Учебный курс : учебное пособие / Н. М. Войтов. — Москва : ДМК Пресс, 2010. — 216 с. — ISBN 978-5-94074-148-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. https://e.lanbook.com/book/1198 |
| 2 | Основная литература | Электронно-библиотечная система издательства Лань | Молекулярное моделирование: теория и практика : учебное пособие / Х. -. Хельтье, В. Зипль, Д. Роньян, Г. Фолькерс ; перевод с английского А. А. Олиференко [и др.]. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 322 с. — ISBN 978-5-00101-724-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. https://e.lanbook.com/book/151560 |

Перечень используемого программного обеспечения:

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

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -The Cambridge Crystallographic Data Centre(31.12.2023)

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

| Вид занятий | № ауд. | Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий |
|-------------|-------------|--|
| | 208 (1а) | Персональные компьютеры, проектор |
| | 207 (1а) | Локальный вычислительный комплекс на процессорах CPU Intel Xeon E5-2697, 18 ядер |