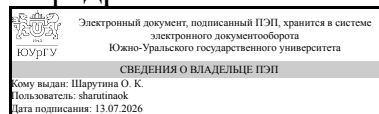


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей
кафедрой



О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.М1.03.02 Основы метода молекулярной динамики: проектное обучение

для направления 04.04.01 Химия

уровень Магистратура

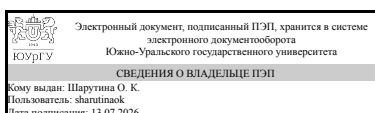
магистерская программа Хемоинформатика

форма обучения очная

кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

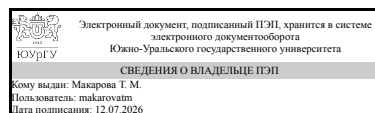
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

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 углубленное освоение студентом многообразия методов молекулярно-динамического моделирования для различных химических систем. Задачами дисциплины являются: 1. Изучение теоретических основ метода равновесной молекулярной динамики 2. Изучение метода метадинамики 3. Изучение дополнительных методов молекулярной динамики, например, динамика по Ярынскому 4. Освоение методов измерения расчетных физико-химических свойств протяженных фаз в молекулярно-динамической модели

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 преподаются различные методы молекулярной динамики и основные методы анализа полученных траекторий.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-6 Способен выбирать и применять методы моделирования атомно-молекулярных систем к различным типам химических соединений и получать достоверные структурные модели	Знает: Теоретические основы различных метода молекулярная динамика для компьютерного моделирования структуры и свойств атомно-молекулярных систем Умеет: Моделировать структуру химических соединений и многокомпонентных систем с применением различных методов молекулярной динамики Имеет практический опыт: Выбора и применения комбинации методов получения достоверной структурной модели химических соединений или систем

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., 58,75 ч.
контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		2	3
Общая трудоёмкость дисциплины	288	144	144
<i>Аудиторные занятия:</i>	32	16	16
Лекции (Л)	0	0	0
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0	0
Лабораторные работы (ЛР)	32	16	16
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	229,25	111,75	117,5
Подготовка к контрольному мероприятию №1	15	15	0
Подготовка к контрольному мероприятию №8	15	0	15
Подготовка к зачету за I семестр	31,75	31,75	0
Подготовка к контрольному мероприятию №9	15	0	15
Подготовка к контрольному мероприятию №10	20	0	20
Подготовка к контрольному мероприятию №7	15	0	15
Подготовка к контрольному мероприятию №11	15	0	15
Подготовка к контрольному мероприятию №5, составление литературного обзора по методам расчета свойств моделируемых систем	15	15	0
Подготовка к контрольному мероприятию №4	15	15	0
Подготовка к контрольному мероприятию №3	20	20	0
Подготовка к экзамену за II семестр	37,5	0	37,5
Подготовка к контрольному мероприятию №2	15	15	0
Консультации и промежуточная аттестация	26,75	16,25	10,5
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	зачет	экзамен

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Силовые поля и параметры молекулярной динамики	10	0	0	10
2	Разнообразие методов молекулярно-динамического моделирования	12	0	0	12
3	Расчет физико-химических свойств в молекулярно-динамической модели	10	0	0	10

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 силового поля для равновесной динамики	5
2	1	Вычисление параметров, необходимых для молекулярно-динамического моделирования системы	5
3	2	Равновесная молекулярная динамика	2
4	2	Моделирование метадинамики и анализ ее результатов	6
5	2	Молекулярная динамика по Ярынскому	4
6	3	Расчет физико-химических свойств моделируемой системы	4
7	3	Построение зависимости физико-химических свойств от топологического состояния системы	6

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС			
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Семестр	Кол-во часов
Подготовка к контрольному мероприятию №1	Юрчук С.Ю. "Компьютерное моделирование нанотехнологий наноматериалов и наноструктур моделирование наносистем методами молекулярной динамики : курс лекций", гл. 2	2	15
Подготовка к контрольному мероприятию №8	Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. "Основы компьютерного моделирования наносистем", гл. 5; база данных Scopus	3	15
Подготовка к зачету за I семестр	Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика", гл. 1-2; Юрчук С.Ю. "Компьютерное моделирование нанотехнологий наноматериалов и наноструктур моделирование наносистем методами молекулярной динамики : курс лекций", гл. 2	2	31,75
Подготовка к контрольному мероприятию №9	Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика", гл. 1-4; Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. "Основы компьютерного моделирования наносистем", гл. 4-8; база данных Scopus	3	15
Подготовка к контрольному мероприятию №10	Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика", гл. 1-4; Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. "Основы компьютерного моделирования наносистем", гл. 4-8	3	20
Подготовка к контрольному мероприятию №7	Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика", гл. 1-6; Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н.,	3	15

	Назаров Ю.Ф. "Основы компьютерного моделирования наносистем", гл. 1-4		
Подготовка к контрольному мероприятию №11	Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. "Основы компьютерного моделирования наносистем", гл. 5-8; Юрчук С.Ю. "Компьютерное моделирование нанотехнологий наноматериалов и наноструктур моделирование наносистем методами молекулярной динамики : курс лекций", гл. 2	3	15
Подготовка к контрольному мероприятию №5, составление литературного обзора по методам расчета свойств моделируемых систем	База данных Scopus	2	15
Подготовка к контрольному мероприятию №4	Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 5-6	2	15
Подготовка к контрольному мероприятию №3	Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 4-6	2	20
Подготовка к экзамену за II семестр	Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. "Основы компьютерного моделирования наносистем", гл. 4-8; Юрчук С.Ю. "Компьютерное моделирование нанотехнологий наноматериалов и наноструктур моделирование наносистем методами молекулярной динамики : курс лекций", гл. 2	3	37,5
Подготовка к контрольному мероприятию №2	Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. "Основы компьютерного моделирования наносистем", гл. 4-6; база данных Scopus	2	15

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	2	Текущий контроль	Подбор силового поля для равновесной динамики	1	5	Оценка складывается из составляющих: 4 балла -- подбор силового поля для равновесной динамики выполнен достоверно и в срок. По 0,5 баллов снимается за каждую ошибку в исполнении, искажающую конечный	зачет

						результат или за каждую неделю задержки. 1 балл -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.	
2	2	Текущий контроль	Вычисление параметров, необходимых для молекулярно-динамического моделирования системы	1	5	За каждую ошибку, искажающую результат задачи, снимается по 0,5 баллов. Каждая неделя просрочки задания также оценивается в -0,5 баллов.	зачет
3	2	Текущий контроль	Тест "оптимизация геометрии системы"	1	5	За каждый вопрос начисляется от 1 до 0 баллов, в зависимости от степени правильности ответа на вопрос на множественный выбор. За правильно выбранный вариант ответа доля бала увеличивается, за неправильный -- снижается.	зачет
4	2	Текущий контроль	Тест "Управление процессом молекулярной динамики"	1	5	За каждый вопрос начисляется от 1 до 0 баллов, в зависимости от степени правильности ответа на вопрос на множественный выбор. За правильно выбранный вариант ответа доля бала увеличивается, за неправильный -- снижается.	зачет
5	2	Текущий контроль	Литературный обзор методов моделирования или анализа систем, изучаемых в данном проекте	1	5	5 баллов -- литературный обзор проведен, похожие статьи обобщены, результаты четко и понятно сведены в общую таблицу, в работе не менее 30% работ за последние 5 лет 4 балла -- относительно предыдущего, недостаточно статей за последние 5 лет или есть ошибки в оформлении 3 балла -- практически нет статей за последние 5 лет, таблица заполнена не полностью, формулировки нечеткие 2 балла -- статей сильно меньше, чем их выдает поисковая система, оформлено с грубыми ошибками 1 балл -- обзор практически отсутствует 0 баллов -- обзор отсутствует	зачет
6	2	Промежуточная аттестация	Отчет о проделанной работе	-	5	5 баллов -- отчет составлен, все процедуры и результаты в нем изложены полно, корректно и	зачет

						наглядно, есть корректные и полные выводы 4 балла -- отчет содержит незначительные погрешности или неаккуратно оформлен 3 балла -- отчет написан нечетко, есть фактические ошибки 2 балла -- отчет крайне плохо проработан, присутствуют некорректные выводы, процедуры описаны невоспроизводимо, много грубых ошибок 1 балл -- отчет практически отсутствует 0 баллов -- отчет отсутствует	
7	3	Текущий контроль	Равновесное молекулярно-динамическое моделирование	1	5	Оценка складывается из составляющих: 4 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. 1 балл -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.	экзамен
8	3	Текущий контроль	Моделирование метадинамики и анализ ее результатов	1	5	Оценка складывается из составляющих: 4 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. 1 балл -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.	экзамен
9	3	Текущий контроль	Молекулярная динамика по Ярынскому	1	5	Оценка складывается из составляющих: 4 балла -- задание выполнено полностью, правильно и в срок. По 0,5 баллов снимается за каждую ошибку в исполнении, искажающую конечный результат или за каждую	экзамен

						неделю задержки. 1 балл -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.	
10	3	Текущий контроль	Расчет физико-химических свойств моделируемой системы	1	5	Оценка складывается из составляющих: 4 балла -- расчет физико-химических свойств выполнен правильно, достоверно и в срок. По 0,5 баллов снимается за каждую ошибку в исполнении, искажающую конечный результат или за каждую неделю задержки. 1 балл -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.	экзамен
11	3	Текущий контроль	Построение зависимости физико-химических свойств от топологического состояния системы	1	5	Оценка складывается из составляющих: 4 балла -- построение зависимости физико-химических свойств от топологического состояния системы выполнено правильно, достоверно и в срок. По 0,5 баллов снимается за каждую ошибку в исполнении, искажающую конечный результат или за каждую неделю задержки. 1 балл -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.	экзамен
12	3	Промежуточная аттестация	Экзамен	-	10	Каждый теоретический вопрос оценивается в 2 балла, выполнение задачи -- в 6 баллов. За каждую фактическую ошибку, отсутствие нужных формул или деталей, из баллов за вопрос отнимается 0,5 баллов. За каждую ошибку в осуществляемых процедурах, приводящую к искажению результатов, с задания снимается по 1 баллу.	экзамен

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
------------------------------	----------------------	---------------------

зачет	Оценивание учебной деятельности по дисциплине происходит на основании полученных баллов за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля. Для повышения своего рейтинга студент вправе пройти процедуру зачета. Зачет принимается в форме письменного отчета по результатам проделанной работы в семестре.	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения
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 состоит из 2 теоретических вопросов и 1 задачи на молекулярное моделирование. Оценка выставляется из суммарного рейтинга за задачи текущего контроля и за экзаменационные задания.	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	7	8	9	10	11	12
ПК-6	Знает: Теоретические основы различных метода молекулярная динамика для компьютерного моделирования структуры и свойств атомно-молекулярных систем	++					++		+				+
ПК-6	Умеет: Моделировать структуру химических соединений и многокомпонентных систем с применением различных методов молекулярной динамики				++		++		+			+	+
ПК-6	Имеет практический опыт: Выбора и применения комбинации методов получения достоверной структурной модели химических соединений или систем				+++				+++			+	+

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 : Учеб. для вузов: В 2 кн. . Кн. 1 / 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.
2. Карапетьянц М. Х. Строение вещества : Учеб. пособие для хим. и хим.-технол. спец. вузов / М. Х. Карапетьянц, С. И. Дракин. - 3-е изд., перераб. и доп.. - М. : Высшая школа, 1978. - 304 с. : ил.
3. Численные методы решения одного класса задач математической физики : учеб. пособие по специальности 05.13.18 "Мат. моделирование, численные методы и комплексы программ" и др. / А. А. Замышляева и др.; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Приклад. математика и программирование, Каф. Уравнения мат. физики ; ЮУрГУ. - Челябинск : Издательский Центр ЮУрГУ, 2017. - 86, [1] с. : ил.. URL: http://www.lib.susu.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000558713

б) дополнительная литература:

1. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика Т. 1 Механика Учеб. пособие для физ. спец. ун-тов: В 10 т. - 4-е изд., испр. - М.: Наука, 1988. - 215 с. ил.
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.

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

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Т.М. Макарова Молекулярно-динамическое моделирование посредством программного пакета GROMACS 2019.4 Методические указания

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Т.М. Макарова Молекулярно-динамическое моделирование посредством программного пакета GROMACS 2019.4 Методические указания

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Дополнительная литература	ЭБС издательства Лань	Молекулярная динамика для материаловедов : учебное пособие / И. А. Батаев, К. И. Эмурлаев, Е. Д. Головин [и др.]. — Новосибирск : НГТУ, 2024. — 106 с. — ISBN 978-5-7782-5251-6. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. https://e.lanbook.com/book/514440
2	Методические пособия для самостоятельной работы студента	ЭБС издательства Лань	Медведев, Н. Н. Молекулярная динамика : учебное пособие : в 2 частях / Н. Н. Медведев. — Новосибирск : НГУ, 2023 — Часть 1 : Получение моделей — 2023. — 114 с. — ISBN 978-5-4437-1331-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. https://e.lanbook.com/book/388289

Перечень используемого программного обеспечения:

1. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)"-Портал "Электронный ЮУрГУ" (<https://edu.susu.ru>)(бессрочно)
2. -GNU Fortran(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	№	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника,
-----	---	--

занятий	ауд.	предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
	207 (1a)	Локальный вычислительный комплекс на процессорах CPU Intel Xeon E5-2697, 18 ядер
	208 (1a)	Персональные компьютеры, проектор