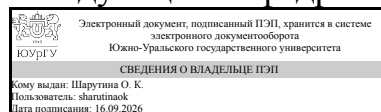


УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой



О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА практики

Практика Производственная практика (преддипломная)

для направления 04.04.01 Химия

Уровень Магистратура

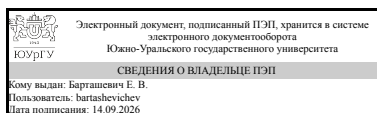
магистерская программа Хемоинформатика

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

Разработчик программы,
д.хим.н., проф., профессор



Е. В. Барташевич

1. Общая характеристика

Вид практики

Производственная

Тип практики

преддипломная

Форма проведения

Дискретно по видам практик

Цель практики

Преддипломная практика как часть основной образовательной программы является завершающим этапом обучения и проводится после освоения студентами теоретической и практической частей программы. Преддипломная практика призвана сформировать навыки молодого специалиста самостоятельно решать конкретные задачи. Преддипломная практика проводится для закрепления и расширения теоретических знаний студентов, получения выпускником профессионального опыта, приобретения более глубоких практических навыков по специальности. Во время прохождения преддипломной практики осуществляется сбор, обобщение и анализ материалов, необходимых для подготовки выпускной квалификационной работы, по защите которой Государственной аттестационной комиссией оценивается готовность будущего специалиста к самостоятельной трудовой деятельности. Поэтому студент должен четко представлять цели, задачи, организационные вопросы, программу практики. Особенность преддипломной практики заключается в том, что она проводится по индивидуальному плану и содержание ее определяется, главным образом, задачами ВКР (выпускной квалификационной работы).

В ходе преддипломной практики студент осуществляет поиск информации (оригинальные статьи в периодических изданиях, в том числе на английском языке, монографии, различные информационные системы и др.), анализирует и систематизирует информацию для формулирования актуальности, новизны и практической значимости выбранной темы научного исследования. Осуществляет планирование и проведение эксперимента, обрабатывает и анализирует результаты. Знакомится с правилами и требованиями к оформлению ВКР. Для руководства практикой студентов назначаются руководители практики, которые оценивают результаты выполнения студентом программы практики.

Задачи практики

- 1) Освоить сбор и систематизацию научной и научно-технической информации по теме ВКР.
- 2) Научиться планированию вычислительного эксперимента, в том числе, с применением методов моделирования многокомпонентной системы химических соединений.
- 3) Закрепить навыки моделирования структуры и свойств атомно-молекулярных

систем и программирования в рамках задач ВКР.

4) Систематизировать и обобщить полученные результаты.

5) Познакомится с правилами и требованиями к оформлению отчетов и ВКР.

6) Научиться оформлять презентацию и и делать устный доклад о проделанной работе.

Краткое содержание практики

1. Подготовительный этап. С руководителем Преддипломной практики и ВКР проходит обсуждение плана работ и формы контрольных мероприятий.

2. Получение индивидуального задания на Преддипломную практику от научного руководителя ВКР. Обоснование актуальности, новизны, практической значимости выбранной темы ВКР.

3. Основной этап - научно-исследовательская работа по заданию руководителя ВКР. Систематизация, анализ и обсуждение результатов исследований.

4. Представление промежуточных результатов на студенческой научной конференции, участие в научной дискуссия с коллегами.

5. Заключительный этап. Написание отчет по практике, структура которого совпадает со структурой ВКР.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате прохождения практики

Планируемые результаты освоения ОП ВО	Планируемые результаты обучения при прохождении практики
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 методов компьютерного моделирования структуры и свойств атомно-молекулярных систем
	Умеет: Моделировать структуру химических соединений и многокомпонентных систем с применением различных методов молекулярного моделирования и квантово-химических расчетов
	Имеет практический опыт: Выбора и применения комбинации методов получения достоверной структурной модели химических соединений или систем
ПК-7 Способен к оценке и прогнозированию физико-химических свойств, биологической активности, реакционной способности атомно-молекулярных систем и их верификации	Знает: Методы и средства расчета физико-химических свойств, прогноза биологической активности, оценки реакционной способности химических соединений и материалов
	Умеет: Обрабатывать результаты молекулярного моделирования и квантово-химических расчетов,

	прогнозировать свойства химических соединений и материалов
	Имеет практический опыт: Прогнозирования свойств химических соединений и материалов и оценки достоверности прогнозов путем сравнения результатов моделирования с экспериментальными данными

3. Место практики в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Моделирование свойств многокомпонентных материалов: проектное обучение Основы метода молекулярной динамики: проектное обучение Молекулярное моделирование полимеров и биополимеров: проектное обучение	

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

Дисциплина	Требования
Основы метода молекулярной динамики: проектное обучение	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
Моделирование свойств многокомпонентных материалов: проектное обучение	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
Молекулярное моделирование полимеров и биополимеров: проектное обучение	Знает: Теоретические основы различных методов моделирования атомно-молекулярных систем Умеет: Моделировать структурные параметры различных химических соединений и многокомпонентных систем с применением различных методов молекулярного моделирования и квантово-химических расчетов Имеет практический опыт: Подбора параметров и отладки способов получения равновесной структуры для химических соединений и многокомпонентных систем; выбора и применения комбинации методов получения достоверной структурной модели

4. Объём практики

Общая трудоемкость практики составляет зачетных единиц 27, часов 972, недель 18.

5. Структура и содержание практики

№ раздела (этапа)	Наименование или краткое содержание вида работ на практике	Кол-во часов
1	Получение информации об особенностях и условиях проведения практики, сроках и формах отчетности. Получение индивидуального задания на преддипломную практику от руководителя. Составление плана проведения практики.	32
2	Поиск информации по теме исследования (оригинальные статьи в периодических изданиях, монографии, патенты и др.) с использованием различных поисковых систем. Обработка, систематизация и анализ информации, соотнесение специфики отечественного и зарубежного опыта по тематике исследований. Формулировка актуальности, новизны и значимости выбранной темы. Формирование "Литературного обзора", как главы ВКР.	120
3	Инструктаж по технике безопасности и ознакомление с правилами внутреннего распорядка на месте прохождения практики. Ознакомление с компьютерным оборудованием и научно-техническими средствами в лаборатории, где будут проводиться экспериментальные исследования. Знакомство с методиками проведения экспериментов. Формирование главы "Экспериментальная часть" ВКР.	120
4	Проведение экспериментальных исследований согласно утвержденному плану.	460
5	Обработка и анализ полученных результатов. Обсуждение результатов с научным руководителем практики и ВКР.	120

7	Написание отчета по преддипломной практике. Оформление презентации к докладу об основных результатах преддипломной практики.	120
---	--	-----

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 зав. кафедрой от 11.10.2021 №306-19/15.

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	4	Текущий контроль	Составление плана проведения практики и календарного плана	1	5	План работы составлен корректно, продуман, студент проявлял инициативу, генерировал идеи при обсуждении плана работы с руководителем - 5. План работы составлен корректно, обсужден с руководителем - 4. Перечень вопросов, подлежащих изучению в рамках практики не полный - 3. Изложение плана работ непоследовательное, из представленного материала трудно сделать заключение	дифференцированный зачет

						об актуальности выбранной темы - 2. Отсутствует формулировка цели и задач - 1. Задание не сдано - 0.	
2	4	Текущий контроль	Поиск информации и систематизация отечественного и зарубежного опыта по теме исследования с использованием различных поисковых систем.	1	5	Литературный обзор полно отображает имеющуюся информацию по выбранной теме, включает анализ публикации в зарубежных журналах - 5. Литературный обзор отображает имеющуюся информацию по выбранной теме, построен логично, но анализ публикации в зарубежных журналах за последние 5 лет отсутствует - 4. Литературный обзор не отображает полную картину состояния изучаемой проблемы - 3. Изложение непоследовательное, из представленного материала трудно сделать заключение об актуальности выбранной темы -2. Отсутствует рассмотрение ключевых для понимания методов и/или исследуемых объектов -1. Задание не сдано - 0.	дифференцированн зачет
3	4	Текущий контроль	Знакомство с методами и методиками проведения компьютерных экспериментов. Формирование главы "Экспериментальная	1	5	Экспериментальная часть содержит подробное описание методов и методик, полно отображает имеющуюся информацию - 5. Экспериментальная часть отображает	дифференцированн зачет

			часть "			имеющуюся информацию о методах и методиках, но их изложение недостаточно подробное: отсутствуют формулы, не указаны функционалы и базисные наборы - 4. В экспериментальной части упущены условия вычислительного эксперимента, нет деталей в методиках, ошибки в изложении характеристик методов - 3. Изложение методов и методик непоследовательное -2. Вместо методов и методик обозначены только компьютерные программы - 1. Задание не сдано - 0.	
4	4	Текущий контроль	Проведение экспериментальных исследований (компьютерный эксперимент) согласно утвержденному плану.	1	5	Прикреплены все файлы выполненных расчетов, которые соответствуют плану работ - 5. В файлах расчетов встречаются ошибки - 4. Объем выполненных расчетов существенно отличается от плана - 3. Запланированная работа выполнена фрагментарно - 2, с грубыми ошибками - 1. Задание не сдано - 0.	дифференцированный зачет
5	4	Текущий контроль	Обработка и анализ полученных результатов	1	5	Результаты систематизированы, данные занесены в	дифференцированный зачет

						таблицы, построены графики, дана оценка погрешностям расчетов, получены статистические характеристики - 5. Данные занесены в таблицы, но не систематизированы полностью, нет оценки погрешностей расчетов - 4. Не получены статистические характеристики - 3. Данные не систематизированы, нет таблиц - 2. Иллюстрации результатов - рисунки структур, схемы алгоритмов или схемы реакций отсутствуют -1. Задание не сдано - 0.	
6	4	Текущий контроль	Подготовка представления полученных результатов в виде презентации и беседа с научным руководителем	1	5	Выводы по результатам экспериментальных исследований обоснованы. Презентация полно и наглядно отражает содержание работы - 5. отчета. Студент владеет материалом, но презентация оформлена бессистемно - 4. Выводы по результатам экспериментальных исследований не обоснованы - 3. Презентация не информативна - 2. Студент плохо владеет материалом - 1. Задание не сдано - 0.	дифференцированный зачет
7	4	Промежуточная аттестация	Отчет по преддипломной практике, устная презентация	-	5	Написан отчет по практике с соблюдением всех формальных	дифференцированный зачет

			полученных результатов			требований. Выводы обоснованы, дана аннотация на английском языке. Устный доклад полно отражает содержание работы - 5. отчета. Студент владеет материалом, но отчет и презентация оформлены не по требованиям - 4. Выводы не обоснованы, не даны ответы на концептуальные вопросы - 3. Отчет не информативен - 2. Студент плохо владеет материалом - 1. Отчет не сдан или презентация отсутствует - 0.	
--	--	--	------------------------	--	--	--	--

7.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Промежуточная аттестация производится в виде презентации результатов проделанной работы и предоставления письменного отчета по преддипломной 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	5	6	7
ПК-6	Знает: Теоретические основы различных методов компьютерного моделирования структуры и свойств атомно-молекулярных систем		+	+				+
ПК-6	Умеет: Моделировать структуру химических соединений и многокомпонентных систем с применением различных методов молекулярного моделирования и квантово-химических расчетов				+			+
ПК-6	Имеет практический опыт: Выбора и применения комбинации методов получения достоверной структурной модели химических соединений или систем	+		+				+
ПК-7	Знает: Методы и средства расчета физико-химических свойств, прогноза биологической активности, оценки реакционной способности химических соединений и материалов			+				+
ПК-7	Умеет: Обрабатывать результаты молекулярного моделирования и квантово-химических расчетов, прогнозировать свойства химических соединений и материалов					+		+
ПК-7	Имеет практический опыт: Прогнозирования свойств химических соединений и материалов и оценки достоверности прогнозов путем сравнения результатов моделирования с экспериментальными данными						+	+

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение практики

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. ил., [12] л. цв. ил.; табл.
2. Физическая химия Кн. 1 Строение 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. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] учеб. пособие для вузов по хим. специальностям В. И. Барановский. - М.: Академия, 2008. - 382, [1] с. ил.
2. 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.

из них методические указания для самостоятельной работы студента:

1. Барташевич Е. В. Структурная организация и количественные дескрипторы физико-химических свойств соединений с галогенными связями по данным о распределении электронной плотности : автореф. дис. ... д-ра хим. наук : специальность 02.00.04 - Физическая химия / Е. В. Барташевич ; науч. консультант В. Г. Цирельсон ; Юж-Урал. гос. ун-т. - Челябинск, 2015. - 30, [1] с. : ил.. URL: <http://dspace.susu.ac.ru/xmlui/handle/0001.74/6767>

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Кручинин, Н. Ю. Молекулярно-динамическое моделирование макромолекул : учебное пособие / Н. Ю. Кручинин. — Оренбург : ОГУ, 2018. — 103 с. — ISBN 978-5-7410-2143-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/159840
2	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 384 с. — ISBN 978-5-8114-1032-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-

			библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/167744
3	Дополнительная 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: https://e.lanbook.com/book/131721

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. -Firefly(бессрочно)
3. -LibreOffice(бессрочно)
4. -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
НИЛ Многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов ЮУрГУ	454080, Челябинск, Ленина, 76	1. Доступ к суперкомпьютерам: 1) Торнадо ЮУрГУ(НИУ) – пиковая вычислительная мощность до 47,5 TFlops. 2) Доступ к вычислительному комплексу на базе GPU NVidia K40 из трёх вычислительных серверов с графическими ускорителями NVidia Tesla K40m с пиковой производительностью 4TFlops каждый, ЮУрГУ(НИУ). Это оборудование будет задействовано для высокопроизводительных расчётов и моделирования структуры и свойств многокомпонентных химических систем и материалов. 2. Компьютеры: рабочие станции, необходимые для квантово-механических расчётов молекулярных комплексов, применения методов молекулярной динамики и математической обработки результатов.