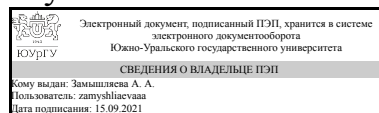


УТВЕРЖДАЮ
Директор института
Институт естественных и точных
наук



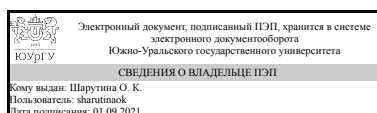
А. А. Замышляева

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА практики

Практика Производственная практика, технологическая практика
для направления 04.04.01 Химия
Уровень Магистратура
магистерская программа Хемоинформатика
форма обучения очная
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

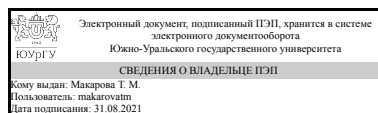
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

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



О. К. Шарутина

Разработчик программы,
к.хим.н., доцент



Т. М. Макарова

1. Общая характеристика

Вид практики

Производственная

Тип практики

научно-исследовательская работа

Форма проведения

Дискретно по видам практик

Цель практики

Целью практики является обучение студента согласованной работе над поставленным научным проектом по молекулярному моделированию многокомпонентных систем и выполнению конкретных задач в рамках этого проекта.

Задачи практики

Задачами практики являются:

- 1) Построение совместного плана работы над проектом по молекулярно-динамическому моделированию многокомпонентной системы
- 2) Построение структуры многокомпонентной системы
- 3) Построение молекулярно-механической модели многокомпонентной системы
- 4) Проведения процедур молекулярно-динамического моделирования
- 5) Написание отчета о проделанной работе

Краткое содержание практики

Дисциплина изучается в рамках программы проектного обучения "Моделирование структуры и свойств кристаллических и гибридных наноматериалов", рассчитанного на 2 года магистратуры. В рамках дисциплины студенты обучаются навыкам комплексной работы над проектом и выполнения компьютерного моделирования атомно-молекулярных систем

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате прохождения практики

Планируемые результаты освоения ОП ВО	Планируемые результаты обучения при прохождении практики
УК-3 Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели	Знает: Принципы распределения задач в рамках проекта
	Умеет: Взаимодействовать с коллегами при выполнении смежных задач
	Имеет практический опыт: Работы в

	команде над общим проектом
ПК-4 Способен к компьютерному моделированию атомно-молекулярных систем их структурных особенностей, прогнозу их физико-химических свойств и биологической активности	Знает: Функционал программного обеспечения для построения атомно-молекулярных систем
	Умеет: Обработать результаты молекулярно-динамического моделирования
	Имеет практический опыт: Систематизации и оформления результатов вычислительных экспериментов

3. Место практики в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Основы метода молекулярной динамики: проектное обучение Молекулярное моделирование полимеров и биополимеров: проектное обучение Моделирование свойств многокомпонентных материалов: проектное обучение Философия научного знания Химия алколоидов: 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: Жизненный цикл проектов, технологии организации проектов, Функционал программного обеспечения для молекулярно-динамического моделирования Умеет: Планировать свою научно-исследовательскую деятельность в рамках задач, поставленных руководителем проекта , Осуществлять молекулярно-динамическое моделирование с различными параметрами Имеет практический опыт: Написания отчетов о проделанных исследованиях, Подбора и настройки параметров молекулярно-динамического моделирования для конкретной химической системы
Философия научного знания	Знает: принципы и методы организации командной работы в рамках курса философии науки

	<p>Умеет: применять методы командной работы в исследовательской и проектной деятельности в рамках курса философии науки</p> <p>Имеет практический опыт: работы в команде по решению задач с использованием содержания курса философии науки</p>
Химия алкалоидов: проектное обучение	<p>Знает: Особенности строения алкалоидов</p> <p>Умеет: Конструировать молекулярно-механические системы, содержащие различные алкалоиды</p> <p>Имеет практический опыт: Подбора силовых полей для моделирования систем, содержащих алкалоиды</p>
Молекулярное моделирование полимеров и биополимеров: проектное обучение	<p>Знает: Особенности строения полимеров и биополимеров</p> <p>Умеет: Конструировать системы полимеров и биополимеров в ячейке с периодическими граничными условиями</p> <p>Имеет практический опыт: Создания многокомпонентных молекулярно-механических моделей</p>
Моделирование свойств многокомпонентных материалов: проектное обучение	<p>Знает: Функционал программного обеспечения в области структурной химии</p> <p>Умеет: Конструировать многокомпонентные атомно-молекулярные системы</p> <p>Имеет практический опыт: Оптимизации структур для молекулярно-динамического моделирования</p>

4. Объём практики

Общая трудоемкость практики составляет зачетных единиц 12, часов 432, недель 8.

5. Содержание практики

№ раздела (этапа)	Наименование или краткое содержание вида работ на практике	Кол-во часов
1	Определение плана совместной работы над проектом	60
2	Написание индивидуальных календарных планов	30
3	Совместное построение многокомпонентной системы	80
4	Совместный подбор силового поля и условий моделирования для молекулярной динамики системы	100
5	Анализ результатов молекулярного моделирования многокомпонентной системы	62
6	Написание отчета по технологической практике	100

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 П
4	4	Текущий контроль	Настройка параметров молекулярной динамики	1	3	3 балла - задание выполнено полностью корректно 2 балл - задание выполнено с незначительными огрехами, слабо влияющими на результат 1 балл - задание выполнено с существенными ошибками, радикально искажающими результат 0 баллов - задание не выполнено	дифференцированный зачет
10	4	Промежуточная аттестация	Отчет о проделанной работе	1	5	Отлично: Задание на практику выполнено полностью. Отчет оформлен в соответствии с требованиями, логично, грамотно, выводы по результатам моделирования обоснованы. Презентация полно и наглядно отражает результаты. Хорошо: Задание на практику выполнено полностью. Отчет содержит некоторые	дифференцированный зачет

						ошибки. Удовлетворительно: Задание на практику выполнено не полностью. Отчет содержит некоторые ошибки. Не оформлен титульный лист. Неудовлетворительно: Задание на практику не выполнено. Отчет отсутствует.	
3	4	Текущий контроль	Построение стартовой структуры для моделирования	1	3	3 балла - задание выполнено полностью корректно 2 балл - задание выполнено с незначительными огрехами, слабо влияющими на результат 1 балл - задание выполнено с существенными ошибками, радикально искажающими результат 0 баллов - задание не выполнено	дифференцированный зачет
2	4	Текущий контроль	Титульный лист отчета	1	2	2 балла - титульный лист оформлен верно 1 балл - титульный лист оформлен с ошибками или огрехами 0 баллов - титульный лист не предоставлен	дифференцированный зачет
5	4	Текущий контроль	Подбор силового поля для молекулярной динамики	1	3	3 балла - задание выполнено полностью корректно 2 балл - задание выполнено с незначительными огрехами, слабо влияющими на результат 1 балл - задание выполнено с существенными ошибками, радикально искажающими результат 0 баллов - задание не выполнено	дифференцированный зачет
6	4	Текущий контроль	Сравнение характеристик полученных траекторий	1	3	3 балла - задание выполнено полностью корректно 2 балл - задание выполнено с незначительными огрехами, слабо	дифференцированный зачет

						<p>влияющими на результат 1 балл - задание выполнено с существенными ошибками, радикально искажающими результат 0 баллов - задание не выполнено</p>	
7	4	Текущий контроль	Анализ взаимодействий в траекториях	1	3	<p>3 балла - задание выполнено полностью корректно 2 балл - задание выполнено с незначительными огрехами, слабо влияющими на результат 1 балл - задание выполнено с существенными ошибками, радикально искажающими результат 0 баллов - задание не выполнено</p>	дифференциров зачет
9	4	Текущий контроль	Индивидуальный календарный план	1	2	<p>2 балла - календарный план оформлен верно 1 балл - календарный план оформлен с ошибками или неточностями 0 баллов - календарный план не предоставлен</p>	дифференциров зачет
1	4	Текущий контроль	План вычислительных экспериментов при работе над проектом	1	5	<p>5 баллов -- план составлен, роли в нем распределены равномерно, процедуры молекулярного моделирования соответствуют задаче и выстроены в логическом порядке 4 балла -- план содержит незначительные несогласованности или в нем нет детализации одной-двух задач 3 балла -- план написан размыто, мало указано конкретных задач, часть сроков малореалистична 2 балла -- план практически не</p>	дифференциров зачет

						проработан, мало конкретных задач, плохо согласован во времени 1 балл -- план практически отсутствует 0 баллов - - план отсутствует	
8	4	Текущий контроль	Расчет характеристик многокомпонентной системы	1	3	3 балла - задание выполнено полностью корректно 2 балл - задание выполнено с незначительными огрехами, слабо влияющими на результат 1 балл - задание выполнено с существенными ошибками, радикально искажающими результат 0 баллов - задание не выполнено	дифференцированный зачет

7.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Промежуточная аттестация производится в виде предоставления письменного отчета по производственной технологической 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	8	9	10
УК-3	Знает: Принципы распределения задач в рамках проекта	+									+
УК-3	Умеет: Взаимодействовать с коллегами при выполнении смежных задач	+	+								++
УК-3	Имеет практический опыт: Работы в команде над общим проектом										++
ПК-4	Знает: Функционал программного обеспечения для построения атомно-молекулярных систем			+			+		+		
ПК-4	Умеет: Обрабатывать результаты молекулярно-динамического моделирования				+	+	+	+	+		
ПК-4	Имеет практический опыт: Систематизации и оформления результатов вычислительных экспериментов				+	+		+			

Фонды оценочных средств по каждому контрольному 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. Gromacs: справочный мануал, версия 5.1.5

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование разработки	Наименование ресурса в электронной форме	Доступность (сеть Интернет / локальная сеть; авторизованный / свободный доступ)
1	Основная литература	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	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Интернет / Авторизованный
2	Дополнительная литература	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	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Интернет / Авторизованный

9. Информационные технологии, используемые при проведении практики

Перечень используемого программного обеспечения:

1. -Python(бессрочно)

Перечень используемых информационных справочных систем:

1. -The Cambridge Crystallographic Data Centre(бессрочно)

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
---	-------------------------------	--