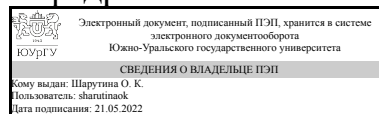


УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей
кафедрой



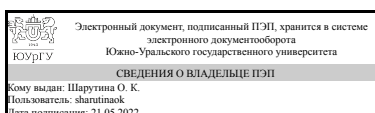
О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.М2.01 Моделирование структуры многокомпонентных материалов: проектное обучение для направления 04.04.01 Химия
уровень Магистратура
магистерская программа Хемоинформатика
форма обучения очная
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

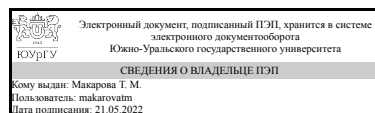
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

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 овладение студентом теоретическими основами метода молекулярной динамики и навыками применения данного метода к получению структур многокомпонентных материалов. В рамках этой цели дисциплина выполняет следующие задачи: 1. Освоение теоретических основ метода молекулярно-динамического моделирования и методике его проведения в пакете GROMACS и других вспомогательных программах 2. Построение молекулярно-механических моделей и стартовых систем, необходимых для расчета молекулярной динамики 3. Овладение различными методами молекулярной динамики, с умением настраивать их и управлять ими 4. Анализ траекторий молекулярной динамики и верификация выбранной модели

Краткое содержание дисциплины

В рамках этого курса, составляющего часть проектного обучения "Моделирование структуры и свойств кристаллических и гибридных наноматериалов", студенты научатся самостоятельно выбирать и отлаживать процедуры молекулярного моделирования для воспроизведения структуры и свойств конкретных систем. 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 основные методы работы со структурными файлами и базами данных, построения молекулярно-механических моделей молекул и их систем и, самое главное, различные методы молекулярно-динамического моделирования и их последующая обработка.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

| Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции) | Планируемые результаты обучения по дисциплине |
|---|---|
| ПК-4 Способен к молекулярному моделированию полимеров и биополимеров, их структурных особенностей | Знает: Основы методов молекулярной механики, квантовой химии и молекулярной динамики Умеет: Осуществлять молекулярно-динамическое моделирование химических систем, в том числе, многокомпонентных; конструировать системы полимеров и биополимеров в ячейке с периодическими граничными условиями Имеет практический опыт: Отладки параметров и условий молекулярно-механического и молекулярно-динамического моделирования высокомолекулярных соединений и многокомпонентных систем с полимерами и/или биополимерами |

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

| | |
|---|---|
| Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана | Перечень последующих дисциплин, видов работ |
|---|---|

| | |
|-----|------------------|
| Нет | Не предусмотрены |
|-----|------------------|

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 14 з.е., 504 ч., 113 ч. контактной работы

| Вид учебной работы | Всего часов | Распределение по семестрам в часах | |
|---|-------------|------------------------------------|---------|
| | | Номер семестра | |
| | | 1 | 2 |
| Общая трудоёмкость дисциплины | 504 | 252 | 252 |
| <i>Аудиторные занятия:</i> | 96 | 48 | 48 |
| Лекции (Л) | 0 | 0 | 0 |
| Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ) | 0 | 0 | 0 |
| Лабораторные работы (ЛР) | 96 | 48 | 48 |
| <i>Самостоятельная работа (СРС)</i> | 391 | 195,5 | 195,5 |
| с применением дистанционных образовательных технологий | 0 | | |
| Подготовка к контрольному мероприятию №1, обзор литературы | 30 | 30 | 0 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №9, индивидуальное ПО для моделирования | 40 | 0 | 40 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №5, запуск МД | 30 | 30 | 0 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №2, тест | 20 | 20 | 0 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №10, структура методами МД | 40 | 0 | 40 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №11, изучение взаимодействий | 40 | 0 | 40 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №6, анализ траекторий | 30 | 30 | 0 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №4, построение ячейки | 20 | 20 | 0 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №3, основы awk | 30 | 30 | 0 |
| Подготовка к экзамену за II семестр | 35,5 | 0 | 35,5 |
| Подготовка к экзамену за I семестр | 35,5 | 35,5 | 0 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №8, анализ методов в литературе | 40 | 0 | 40 |
| Консультации и промежуточная аттестация | 21 | 10,5 | 10,5 |
| Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен) | - | экзамен | экзамен |

5. Содержание дисциплины

| № раздела | Наименование разделов дисциплины | Объем аудиторных занятий по видам в часах | | | |
|-----------|---|---|---|----|----|
| | | Всего | Л | ПЗ | ЛР |
| 1 | Построение молекулярных моделей компонентов системы | 12 | 0 | 0 | 12 |
| 2 | Освоение ПО для молекулярной динамики и методов алгоритмизации операций в них | 18 | 0 | 0 | 18 |
| 3 | Анализ траекторий моделируемой системы | 12 | 0 | 0 | 12 |
| 4 | Создание авторского ПО для обработки файлов молекулярного моделирования | 18 | 0 | 0 | 18 |
| 5 | Подбор параметров силового поля, метода и условий моделирования для конкретной задачи проекта | 12 | 0 | 0 | 12 |
| 6 | Расчет свойств отдельных компонентов системы для подтверждения модели | 12 | 0 | 0 | 12 |
| 7 | Изучение взаимодействий компонентов в модели многокомпонентной системы | 12 | 0 | 0 | 12 |

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 | Построение структур компонентов моделируемой системы | 6 |
| 2 | 1 | Построение молекулярно-механических моделей компонентов моделируемой системы | 6 |
| 3 | 2 | Построение элементарной ячейки многокомпонентной системы | 6 |
| 4 | 2 | Оптимизация энергии структуры многокомпонентной системы | 6 |
| 5 | 2 | Запуск молекулярной динамики многокомпонентной системы | 6 |
| 6 | 3 | Расчет интегральных свойств моделируемой системы | 6 |
| 7 | 3 | Построение картины межмолекулярных взаимодействий многокомпонентной системы | 6 |
| 8 | 4 | Освоение объектов и классов в Python для обработки файлов данных молекулярного моделирования | 6 |
| 9 | 4 | Освоение управления процессами и распределенного расчета в Python для запуска задач молекулярного моделирования | 6 |
| 10 | 4 | Создание авторского ПО для управления процессами молекулярного моделирования и обработки его результатов | 6 |
| 11 | 5 | Подбор оптимального силового поля для изучаемой системы | 6 |
| 12 | 5 | Выбор оптимальной последовательности процедур для моделирования изучаемой системы | 6 |
| 13 | 6 | Расчет вязкости и других характеристик исходной смеси в модели | 6 |
| 14 | 6 | Расчет характеристик тонкого слоя подложки в многокомпонентной системе | 6 |

| | | | |
|----|---|--|---|
| 15 | 7 | Изучение энергетических характеристик взаимодействия полимера и подложки многокомпонентной системы | 6 |
| 16 | 7 | Изучение отдельных нековалентных взаимодействий в системе и их энергии | 6 |

5.4. Самостоятельная работа студента

| Выполнение СРС | |
|---|---|
| Подвид СРС | Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс |
| Подготовка к контрольному мероприятию №1, обзор литературы | Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика" гл 1-2; база данных Scopus |
| Подготовка к контрольному мероприятию №9, индивидуальное ПО для моделирования | Маккинни, У. Python и анализ данных, гл. 4-6 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №5, запуск МД | Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика" гл 2.2-2.3; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл 2.3.6 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №2, тест | https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6054138/mod_resource/content/1/lecture_3_topologies.pdf ; Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров", гл 4-6 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №10, структура методами МД | https://edu.susu.ru/pluginfile.php/8053518/mod_resource/content/1/lecture_python_6.pdf ; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл. 2.3.6 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №11, изучение взаимодействий | Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров", гл 4-7; база данных Scopus |
| Подготовка к контрольному мероприятию №6, анализ траекторий | https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6339006/mod_resource/content/1/lecture_4.5.pdf |
| Подготовка к контрольному мероприятию №4, построение ячейки | Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика" гл 2.2-2.3; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл 2.3.6 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №3, основы | https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6054138/mod_resource/content/1/lecture_3_topologies.pdf ; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл. 2.4 |

| | |
|---|---|
| awk | |
| Подготовка к экзамену за II семестр | Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика" гл 1-2; Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров", гл 4-8 |
| Подготовка к экзамену за I семестр | Х.-Д. Хельтье и др. Молекулярное моделирование : теория и практика, гл. 1; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл. 1-2 |
| Подготовка к контрольному мероприятию №8, анализ методов в литературе | База данных Scopus |

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 | 1 | Текущий контроль | Индивидуальное задание по поиску информации о моделируемой системе | 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 | экзамен |
| 2 | 2 | Текущий контроль | Тест "Молекулярно-механическая | 1 | 10 | За каждый ответ на вопрос начисляется от 0 до 1. Полностью | экзамен |

| | | | | | | | |
|---|---|--------------------------|--|---|----|--|---------|
| | | | модель" | | | правильный ответ оценивается в 1 балл, при множественном выборе из n правильных и m неправильных вариантов за каждый правильный вариант начисляется по 1/n баллов, а за каждый выбранный неправильный вариант вычитается 1/m баллов. | |
| 3 | 1 | Текущий контроль | Построение молекулярно-механических моделей молекул | 1 | 5 | Максимальный балл дается за все правильно построенные модели молекул По 1 баллу вычитается за существенные недочеты при построении для каждой из молекул (например, ошибки в зарядах) | экзамен |
| 4 | 1 | Текущий контроль | Построение элементарной ячейки | 1 | 5 | 5 баллов -- соблюдены соотношения компонентов, все процедуры выполнены правильно По 1 баллу снимается за каждую существенную ошибку в построении, влияющую на результат, а также за просрок сдачи задания на каждую неделю. | экзамен |
| 5 | 1 | Текущий контроль | Запуск молекулярной динамики | 1 | 5 | 5 баллов -- соблюдены все параметры МД, в том числе температурный режим, способствующий правильной конденсации компонентов По 1 баллу снимается за каждую существенную ошибку в построении и в протоколе оптимизации, влияющую на результат, а также за просрок сдачи задания на каждую неделю. | экзамен |
| 6 | 1 | Текущий контроль | Анализ траекторий молекулярной динамики средствами GROMACS | 1 | 5 | 5 баллов -- выполнены все виды анализа, без ошибок и построены все таблицы и графики, указанные в задании По 1 баллу снимается за каждый невыполненный элемент задания, за каждую существенную ошибку в построении и в протоколе оптимизации, влияющую на результат, а также за просрок сдачи задания на каждую неделю. | экзамен |
| 7 | 1 | Промежуточная аттестация | Экзамен за I 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: | экзамен |

| | | | | | | | |
|---|---|------------------|---|---|--|--|---------|
| | | | | | <p>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</p> <p>2 балла -- за полное и достоверное представление результатов, корректные выводы из них</p> <p>1 балл -- за графическую составляющую, корректные, аккуратные и читаемые графики и схемы, а также общее расположение элементов презентации</p> <p>1 балл -- за полную информацию о процедурах и условиях моделирования в каждом конкретном действии, представленную на основных или же дополнительных слайдах</p> <p>5 баллов -- за доклад и ответы на вопросы состоят, в свою очередь, из:</p> <p>1 балл -- доклад изложен за 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> | | |
| 8 | 2 | Текущий контроль | Анализ современной литературы относительно валидации модели | 1 | 5 | <p>5 баллов -- анализ литературы проведен, учтены все статьи в Scopus по теме, похожие статьи обобщены, результаты четко и понятно сведены в общую таблицу, в работе не менее 30% работ за последние 5 лет</p> <p>4 балла -- относительно предыдущего, недостаточно статей за последние 5 лет или есть ошибки в оформлении</p> | экзамен |

| | | | | | | | |
|----|---|------------------|--|---|----|---|---------|
| | | | | | | <p>3 балла -- практически нет статей за последние 5 лет, таблица заполнена не полностью, формулировки нечеткие</p> <p>2 балла -- статей сильно меньше, чем их выдает поисковая система, оформлено с грубыми ошибками</p> <p>1 балл -- обзор практически отсутствует</p> <p>0 баллов -- обзор отсутствует</p> | |
| 9 | 2 | Текущий контроль | Написание индивидуального ПО для молекулярного моделирования | 1 | 10 | <p>8 баллов дается за полностью корректно работающую программу, еще 2 балла - за грамотное использование элементов объектно-ориентированного программирования внутри нее. За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 1 баллу. Также по 1 баллу снимается за каждую неделю просрочки.</p> | экзамен |
| 10 | 2 | Текущий контроль | Построение структуры многокомпонентного материала методами молекулярной динамики | 1 | 5 | <p>Оценка складывается из составляющих:</p> <p>3 балла -- построение структуры многокомпонентного материала 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 |
| 11 | 2 | Текущий контроль | Индивидуальное задание в рамках проекта по изучению взаимодействий в многокомпонентной системе | 1 | 5 | <p>Оценка складывается из составляющих:</p> <p>4 балла -- задание по валидации построенной модели выполнено полностью, правильно и в срок. По 0,5 балла снимается за каждую ошибку в исполнении, искажающую конечный результат или за каждую неделю задержки.</p> <p>1 балл -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.</p> | экзамен |

| | | | | | | | |
|----|---|--------------------------|-----------------------|---|----|--|---------|
| 12 | 2 | Промежуточная аттестация | Экзамен за II семестр | - | 10 | <p>Оценка за экзамен состоит из 5 баллов за презентацию и 5 баллов -- за доклад и ответы на вопросы.</p> <p>5 баллов за презентацию состоят из:</p> <p>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</p> <p>2 балла -- за полное и достоверное представление результатов, корректные выводы из них</p> <p>1 балл -- за графическую составляющую, корректные, аккуратные и читаемые графики и схемы, а также общее расположение элементов презентации</p> <p>1 балл -- за полную информацию о процедурах и условиях моделирования в каждом конкретном действии, представленную на основных или же дополнительных слайдах</p> <p>5 баллов -- за доклад и ответы на вопросы состоят, в свою очередь, из:</p> <p>1 балл -- доклад изложен за 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> | экзамен |
|----|---|--------------------------|-----------------------|---|----|--|---------|

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 (модификация молекулярно-механических моделей под конкретную систему, построение модели многокомпонентной системы) и ответа им на дополнительные вопросы, в т. ч. по теории молекулярного моделирования. | 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 проводится в форме презентации студентом результатов своей работы по проекту (первичное построение и отработка молекулярно-механической модели компонентов системы) 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 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | |
| ПК-4 | Знает: Основы методов молекулярной механики, квантовой химии и молекулярной динамики | | | + | + | + | + | | | | | | | + |
| ПК-4 | Умеет: Осуществлять молекулярно-динамическое моделирование химических систем, в том числе, многокомпонентных; конструировать системы полимеров и биополимеров в ячейке с периодическими граничными условиями | | | | | + | + | + | | | + | + | + | |
| ПК-4 | Имеет практический опыт: Отладки параметров и условий молекулярно-механического и молекулярно-динамического моделирования высокомолекулярных соединений и многокомпонентных систем с полимерами и/или биополимерами | | | | | | | + | | + | + | + | | + |

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Владимирова, В. С. Уравнения математической физики [Текст] Учеб. для вузов В. С. Владимирова, В. В. Жаринов. - М.: Физико-математическая литература: Лаборатория базовых, 2000
2. Физика твердого тела Учеб. пособие для вузов, изучающих курс физики твердого тела И. К. Верещагин, С. М. Кокин, В. А. Никитенко и др.; Под ред. И. К. Верещагина. - 2-е изд, испр. - М.: Высшая школа, 2001. - 236, [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.
3. 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. Шнейвайс А.Б. Азы GNUPLOTa
2. Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров"
3. Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко Современные методы молекулярного моделирования

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

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

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 https://e.lanbook.com/book/1198 |
| 2 | Основная литература | Электронно-библиотечная система издательства Лань | Молекулярное моделирование: теория и практика : учебное пособие / Х. -. Хельтье, В. Зиппль, 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 https://e.lanbook.com/book/151560 |
| 3 | Методические пособия для самостоятельной работы студента | 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 https://e.lanbook.com/book/131721 |

Перечень используемого программного обеспечения:

1. -Firefly(бессрочно)
2. -Python(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -The Cambridge Crystallographic Data Centre(бессрочно)

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 |