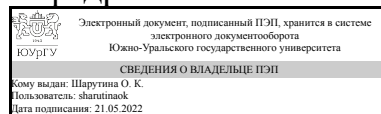


УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий выпускающей  
кафедрой



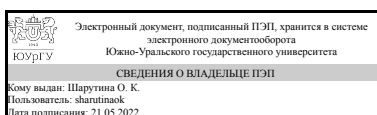
О. К. Шарутина

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

**дисциплины 1.Ф.М2.02 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**

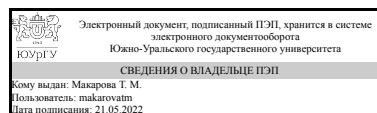
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

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 практика (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., 64,5 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>	48	48	
Лекции (Л)	0	0	
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0	
Лабораторные работы (ЛР)	48	48	
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	223,5	223,5	
с применением дистанционных образовательных технологий	0		
Подготовка к контрольному мероприятию №4	40	40	
Подготовка к контрольному мероприятию №1	20	20	
Подготовка к экзамену за III семестр	63,5	63,5	
Подготовка к контрольному мероприятию №5	40	40	
Подготовка к контрольному мероприятию №2	20	20	
Подготовка к контрольному мероприятию №3	40	40	
Консультации и промежуточная аттестация	18,5	18,5	
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	Усовершенствование силового поля и условий моделирования системы для воспроизведения свойств	16	0	0	16
2	Оптимизация протокола молекулярной динамики для воспроизведения свойств многокомпонентной смеси	16	0	0	16
3	Расчет свойств системы в модели и валидация модели	16	0	0	16

##### 5.1. Лекции

Не предусмотрены

##### 5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

##### 5.3. Лабораторные работы

№	№	Наименование или краткое содержание лабораторной работы	Кол-
---	---	---	------

занятия	раздела		во часов
1	1	Подготовка моделей компонентов системы	4
2	1	Исследование структуры вещества в зависимости от параметров силового поля	6
3	1	Конструирование структуры компонентов системы с заданными свойствами	6
4	2	Написание ПО для запуска протокола молекулярной динамики	4
5	2	Отладка процедуры молекулярной динамики	6
6	2	Изучение свойств компонентов системы в зависимости от условий и процедур молекулярной динамики	6
7	3	Построение многокомпонентной модели с использованием отработанных протоколов и силовых полей	4
8	3	Написание ПО для расчета свойств системы	6
9	3	Расчет свойств системы в молекулярно-динамической модели	6

#### 5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС		
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Сем
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 контрольному мероприятию №1	<a href="https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6339001/mod_resource/content/1/lecture_5_organized.pdf">https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6339001/mod_resource/content/1/lecture_5_organized.pdf</a> ; Х.-Д. Хельтье и др. Молекулярное моделирование : теория и практика, гл. 2.3-2.4	
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 №5	Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров", гл 23; База данных Scopus	
Подготовка к контрольному мероприятию №2	<a href="https://edu.susu.ru/pluginfile.php/5979399/mod_resource/content/1/lecture_4.pdf">https://edu.susu.ru/pluginfile.php/5979399/mod_resource/content/1/lecture_4.pdf</a> ; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл. 2	
Подготовка к контрольному мероприятию №3	Х.-Д. Хельтье и др. Молекулярное моделирование : теория и практика, гл. 4	

#### 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 <math>1/n</math> баллов за каждый выбранный вариант из <math>n</math> правильных, и снимается <math>1/m</math> баллов за каждый выбранный вариант из <math>m</math> 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 <math>1/n</math> баллов за каждый выбранный вариант из <math>n</math> правильных, и снимается <math>1/m</math> баллов за каждый выбранный вариант из <math>m</math> 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 молекулярной динамики	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</p>	экзамен

						отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.	
5	3	Текущий контроль	Индивидуальное задание в рамках проекта по расчету свойств	1	5	<p>Оценка складывается из составляющих:</p> <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
6	3	Промежуточная аттестация	Экзамен за III 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>	экзамен

					1 балл -- в докладе полно и достоверно изложены цели, задачи, результаты и выводы, соответствующие индивидуальной задаче студента в проекте; содержание презентации полностью соответствует докладу	
					3 балла -- ответы на дополнительные вопросы.	

## 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: Обработать 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 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.
2. Хохлов, А. Р. Лекции по физической химии полимеров. - М.: Мир, 2000. - 192 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 GNUMPLOTa
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 GNUMPLOTa
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. <a href="https://e.lanbook.com/book/1198">https://e.lanbook.com/book/1198</a>
2	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Молекулярное моделирование: теория и практика : учебное пособие / Х. - Хельтге, 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 // Лань : электронно-библиотечная система. <a href="https://e.lanbook.com/book/151560">https://e.lanbook.com/book/151560</a>

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