

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
по дисциплине
**«Методы компьютерного моделирования физико-химических процессов
и сложных термодинамических систем»**

**Кафедра физической и органической химии
химического факультета**

Образовательная программа
04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

Профиль подготовки
Физическая химия

Уровень высшего образования
специалитет

Форма обучения
очная

Статус дисциплины: входит в часть ОПОП, формируемую участниками образовательных отношений, дисциплина по выбору

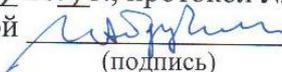
Махачкала, 2021 г.

Рабочая программа по дисциплине «Методы компьютерного моделирования физико-химических процессов и сложных термодинамических систем» составлена в 2021 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (уровень специалитет) от «13» июля 2017 г. № 652.

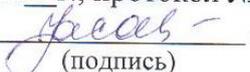
Разработчик: кафедра физической и органической химии, Сулейманов Сагим Икрамович, старший преподаватель.

Рабочая программа по дисциплине «Методы компьютерного моделирования физико-химических процессов и сложных термодинамических систем» одобрена:

на заседании кафедры физической и органической химии от «28» мая 2021 г., протокол № 9.

Зав. кафедрой  проф. Абдулагатов И.М.
(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета от «18» 06 2021 г., протокол № 10.

Председатель  доц. Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа по дисциплине «Методы компьютерного моделирования физико-химических процессов и сложных термодинамических систем» согласована с учебно-методическим управлением

«09» 07 2021 г. 
(подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина «Методы компьютерного моделирования физико-химических процессов и сложных термодинамических систем» входит в часть ОПОП, формируемую участниками образовательных отношений и является дисциплиной по выбору специальности 04.05.01 – «Фундаментальная и прикладная химия».

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической химии.

Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций выпускника: общепрофессиональных ОПК – 6; профессиональных ПК – 1, 2, 3, 4, 5.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: лекции, лабораторные занятия, самостоятельная работа.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости: текущий контроль успеваемости в форме контрольных работ и коллоквиумов; итоговый контроль в форме зачета.

Объем дисциплины 2 зачетные единицы, в том числе в академических часах по видам учебных занятий

Семестр	Учебные занятия						СРС, в том числе экзамен	Форма промежуточной аттестации
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Всего	из них						
Лекции		Лабораторные занятия	Практические занятия	КСР	Консультации			
8	72	20	38	–	–	–	14	Зачет

1. Цели освоения дисциплины

Дисциплина «Методы компьютерного моделирования физико-химических процессов и сложных термодинамических систем» имеет своей целью ознакомить студентов с возможностями современных вычислительных систем применительно к проведению разнообразных расчетов в области физической химии. На практических занятиях студенты учатся проводить нетривиальные и громоздкие вычисления, численно решать системы уравнений, не имеющих аналитических решений, проводить численное решение систем ДУ, описывающих кинетику протекания химических реакций. Провести подобные расчеты вручную практически невозможно, однако с подобными задачами очень часто приходится иметь дело в повседневной научной работе. Студенты не просто решают какие-то конкретные задачи, но и анализируют решения, строя зависимости результатов от исходных параметров. Это позволяет гораздо лучше разобраться в сути моделируемого процесса.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП специалитета

Дисциплина «Методы компьютерного моделирования физико-химических процессов и сложных термодинамических систем» входит в часть ОПОП, формируемую участниками образовательных отношений и является дисциплиной по выбору по специальности 04.05.01 – «Фундаментальная и прикладная химия».

В информационном и логическом планах дисциплина «Методы компьютерного моделирования физико-химических процессов и сложных термодинамических систем» по-

следовательно развивает общие курсы «Численные методы и программирование», «Физическая химия», «Квантовая химия», и, в свою очередь, служит методологической основой при изучении курса «Компьютерная химия». Курс информационно и логически связан с общими курсами «Математика», «Физика» и «Информатика».

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения)

Код и наименование компетенции из ОПОП	Код и наименование индикатора достижения компетенций (в соответствии с ОПОП)	Планируемые результаты обучения	Процедура освоения
<p>ОПК-6. Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе</p>	<p>ОПК-6.1. Грамотно составляет отчет о проделанной работе в письменной форме</p>	<p>Знает: требования к рабочему журналу химика; правила составления протоколов отчетов химических опытов; требования к представлению результатов исследований в виде курсовых и квалификационных работ. Умеет: представить результаты опытов и расчетных работ согласно требованиям в данной области химии; представить результаты химических исследований в соответствии с требованиями к квалификационным работам. Владеет: опытом представления результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ в виде протоколов испытаний, отчетов, курсовых и квалификационных работ.</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос</p>
	<p>ОПК-6.2. Представляет результаты работы в виде научной публикации (тезисы доклада, статья, обзор) на русском и английском языке</p>	<p>Знает: требования к тезисам и научным статьям химического профиля. Умеет: составить тезисы доклада и отдельные разделы статьи на русском и английском языке. Владеет: навыками представления результатов собственных научных изысканий в компьютерных сетях и информационной научно-образовательной среде</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос</p>
	<p>ОПК-6.3. Представляет результаты работы в устной форме на русском и английском языке</p>	<p>Знает: грамматику, орфографию и орфоэпию русского и английского языка.</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос</p>

		<p>Умеет: представить результаты исследований в виде постера; формулировать вопросы к членам профессионального сообщества и отвечать на вопросы по теме проведенного исследования; грамотно и логично изложить результаты проделанной работы в устной форме на русском и английском языке.</p> <p>Владеет: свободно русским и английским языком.</p>	
<p>ПК-1. Способен проводить сбор, анализ и обработку литературных данных для решения поставленной задачи в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>ПК-1.1. Собирает информацию по тематике научного проекта в выбранной области химии с использованием открытых источников информации и специализированных баз данных</p>	<p>Знает: Знает перечень открытых источников информации и специализированных баз данных в области физической химии.</p> <p>Умеет: Пользоваться электронными ресурсами и базами данных, а также периодическими изданиями в области физической химии.</p> <p>Владеет: навыками сбора информации по тематике научного проекта в области физической химии с использованием открытых источников информации и специализированных баз данных, в том числе Scopus и Web of Science.</p>	Устный опрос, письменный опрос
	<p>ПК-1.2. Анализирует и обрабатывает литературные данные по тематике исследования в выбранной области химии</p>	<p>Знает: знает методы систематизации и классификации литературных данных по тематике исследования в области физической химии.</p> <p>Умеет: систематизировать и классифицировать литературные данные по тематике исследования в области физической химии.</p> <p>Владеет: навыками систематизации и классификации литературных данных по тематике исследования в области физической химии.</p>	Устный опрос, письменный опрос
<p>ПК-2. Способен планировать работу и выбирать методы решения поставленных задач в выбранной области химии,</p>	<p>ПК-2.1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий</p>	<p>Знает: методы составления планов отдельных стадий и общего плана исследования в области физической химии.</p> <p>Умеет: составлять планы отдельных стадий и общий</p>	Устный опрос, письменный опрос

химической технологии или смежных с химией науках		плана исследования в области физической химии. Владеет: навыками составления общего плана исследования в области физической химии и детальных планов отдельных стадий.	
	ПК-2.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Знает: экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи в области физической химии исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов. Умеет: выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи в области физической химии исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов. Владеет: навыками выбора экспериментальных и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя в области физической химии из имеющихся материальных и временных ресурсов.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-2.3. Планирование и проведение научно-исследовательских работ по разработке и внедрению нормативных документов по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство	Знает: нормативные документы по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство. Умеет: планировать и проводить научно-исследовательские работы по разработке и внедрению нормативных документов по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство. Владеет: навыками планирования и проведения научно-исследовательских работ по разработке и внедрению нормативных документов по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство.	Устный опрос, письменный опрос
ПК-3. Способен проводить экспериментальные и расчетно-теоретические работы по заданной теме в	ПК-3.1. Проводит экспериментальные исследования по заданной теме в выбранной области химии	Знает: методы проведения экспериментальных исследований по заданной теме в области физической химии. Умеет: проводить	Устный опрос, письменный опрос

выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках		экспериментальные исследования по заданной теме в области физической химии. Владеет: навыками проведения экспериментальных исследований под руководством руководителя по заданной теме в области физической химии.	
	ПК-3.2. Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии	Знает: методы расчетно-теоретических исследования по заданной теме в области физической химии. Умеет: проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в области физической химии. Владеет: необходимыми навыками качественного проведения расчетно-теоретических исследований по заданной теме в области физической химии.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-3.3. Управляет высокотехнологичным химическим оборудованием	Знает: технические характеристики высокотехнологического оборудования. Умеет: управлять высокотехнологичным оборудованием. Владеет: навыками управления и обслуживания высокотехнологичного оборудования.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-3.4. Проводит испытания новых образцов продукции	Знает: методы проведения испытания новых образцов продукции. Умеет: проводить испытания новых образцов продукции. Владеет: навыками испытания новых образцов продукции.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-3.5. Разрабатывает новые методики контроля сырья, прекурсоров и готовой продукции	Знает: методологию разработки новых методик контроля сырья, прекурсоров и готовой продукции. Умеет: проверять правильность новых методик контроля сырья, прекурсоров и готовой продукции. Владеет: навыками разработки новых методик контроля сырья, прекурсоров и готовой продукции и проверки их правильности.	Устный опрос, письменный опрос

<p>ПК-4. Способен обрабатывать и интерпретировать результаты проведенных работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов</p>	<p>ПК-4.1. Обрабатывает полученные данные с использованием современных методов анализа информации</p>	<p>Знает: современные методы анализа информации. Умеет: применять современные методы анализа информации для обработки полученных данных. Владеет: навыками обработки полученных результатов анализа реальных объектов с использованием современных методов анализа информации.</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос</p>
	<p>ПК-4.2. Грамотно интерпретирует результаты исследований в выбранной области химии</p>	<p>Знает: методы интерпретации результатов исследований в области физической химии. Умеет: грамотно интерпретировать результаты исследований в области физической химии. Владеет: навыками интерпретации и наглядного представления результатов исследований в области физической химии.</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос</p>
	<p>ПК-4.3. Анализирует результаты испытаний сырья, прекурсоров, готовой продукции; оценивает степень их соответствия нормативным документам (стандартам и технологическим регламентам)</p>	<p>Знает: стандарты и технологические регламенты сырья, прекурсоров, готовой продукции. Умеет: анализировать результаты испытаний сырья, прекурсоров, готовой продукции. Владеет: навыками статистической обработки результатов испытаний сырья, прекурсоров, готовой продукции; оценки степени их соответствия стандартам и технологическим регламентам.</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос</p>
<p>ПК-5. Способен проводить критический анализ полученных результатов и оценивать перспективы продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>ПК-5.1. Критически анализирует полученные результаты исследований в выбранной области химии, выявляет достоинства и недостатки</p>	<p>Знает: методы критического анализа полученных результатов исследований в области физической химии, способы выявления достоинств и недостатков. Умеет: критически анализировать полученные результаты научных исследований в области физической химии. Владеет: навыками критического анализа полученных результатов научных исследований в</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос</p>

		области физической химии.	
	ПК-5.2. Готовит отдельные разделы отчетов по результатам НИР и НИОКР в выбранной области химии	Знает: методологию подготовки отчетов по результатам НИР и НИОКР в области физической химии. Умеет: готовить отдельные разделы отчетов по результатам НИР и НИОКР в области физической химии. Владеет: навыками подготовки отдельных разделов отчетов по результатам НИР и НИОКР в области физической химии.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-5.3. Формулирует рекомендации по продолжению исследования в выбранной области химии	Знает: способы подготовки рекомендаций по продолжению исследования в области физической химии. Умеет: формулировать рекомендации по продолжению исследования в области физической химии. Владеет: навыками формулировки рекомендаций по продолжению исследования в области физической химии.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-5.4. Анализирует полученные результаты и формулирует предложения по оптимизации отдельных стадий технологического процесса	Знает: методы анализа полученных результатов и оптимизации отдельных стадий технологического процесса. Умеет: анализировать полученные результаты и формулировать предложения по оптимизации отдельных стадий технологического процесса. Владеет: навыками анализа полученных результатов и разработки предложений по оптимизации отдельных стадий технологического процесса.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-5.5. Разрабатывает техническую документацию и регламенты	Знает: виды технической документации и регламентов в области физической химии. Умеет: разрабатывать техническую документацию и регламенты в области физической химии. Владеет: навыками и практическим опытом разработки технической документации и регламентов в области физической химии.	Устный опрос, письменный опрос

4. Объем, структура и содержание дисциплины

4.1. Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часов.

4.2. Структура дисциплины

№	Разделы и темы дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра). Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	КСР		
Модуль 1. Поиск научной информации. Метод молекулярной динамики									
1	Поиск научной информации в Интернете	8		2	–	6	–	4	Устный опрос, тестирование
2	Основные положения и ограничения применимости метода молекулярной динамики	8		4	–	6	–	2	Устный опрос, тестирование
3	Равновесные молекулярно-динамические модели	8		4	–	6	–	2	Устный опрос, тестирование
<i>Итого по модулю 1</i>		36		10	–	18	–	8	Коллоквиум
Модуль 2. Метод Монте-Карло									
1	Основные положения метода Монте-Карло	8		4	–	8	–	2	Устный опрос, тестирование
2	Метод Монте-Карло в классической статистике	8		6	–	12	–	4	Устный опрос, тестирование
<i>Итого по модулю 2</i>		36		10	–	20	–	6	Коллоквиум
Итого		72		20	–	38	–	14	Зачет

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам

4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине

Модуль 1. Поиск научной информации. Метод молекулярной динамики

Тема 1. Поиск научной информации в Интернете

Специализированные поисковые системы для поиска научной информации: Scirus, SciFinder, Scopus, scholar.google.com, Интернет ресурсы с научной периодикой: elibrary.ru, www.sciencedirect.com, pubs.acs.org, Базы данных: webbook.nist.gov, www.webelements.com, www.chemspider.com, Патентные базы данных: ep.espacenet.com, patents.uspto.gov, www.ipdl.jpo.go.jp, Основные возможности поисковых систем и правила составления запросов.

Тема 2. Основные положения и ограничения применимости метода молекулярной динамики

Численное интегрирование уравнений движения. Межчастичное взаимодействие. Граничные условия (периодические граничные условия для однородных систем, поверхность, кластеры, и др.). Начальные условия в стационарном и нестационарных случаях. Исследование равновесных систем, выход на равновесие, длина траектории. Пример исследования релаксации. Управляемая молекулярная динамика. Потенциалы межчастичного взаимодействия. Потенциалы внедренного атома. Насыщение химических взаимодействий. Исключение вкладов связанных состояний.

Тема 3. Равновесные молекулярно-динамические модели

Фундаментальные соотношения (первые принципы), используемые при диагностике: статистическая сумма, конфигурационный интеграл, строгие выражения для энергии, давления, теплоёмкости, тензора упругих напряжений и пр.; формулы Кубо-Грина и Эйнштейна-Гельфанда для коэффициентов диффузии, теплопроводности, вязкости и пр. Замена усреднения по фазовому пространству усреднением по времени. Пространственные и временные корреляции частиц. Радиальные функции распределения, корреляционные функции, флуктуации, их спектры. Термодинамические свойства и корреляционные функции. Автокорреляционные функции. Пространственно-временные корреляции частиц, Фурье-образы. Динамический структурный фактор. Коэффициенты переноса и др. Примеры для однородных фаз и двухфазных систем, локализация точки фазового перехода, поверхностное натяжение, фазовые переходы второго рода, кластеры и макромолекулы.

Модуль 2. Метод Монте-Карло

Тема 1. Основные положения метода Монте-Карло

Общее понятие о Марковских цепях. Алгоритм Метрополиса. Существенная выборка.

Тема 2. Метод Монте-Карло в классической статистике

Термодинамические величины в каноническом ансамбле. Алгоритм Метрополиса для канонического ансамбля. Обобщение алгоритма Метрополиса. Большой канонический и изотермически-изобарический ансамбли. Примеры изучения равновесных систем. Химическое и ионизационное равновесия.

4.4. Лабораторные работы

№	Содержание лабораторной работы	Часы
Модуль 1. Поиск научной информации. Метод молекулярной динамики		
1	Лабораторная работа №1. Поиск научной информации	4
2	Лабораторная работа №2. Моделирование структуры ионных расплавов методом МД	4
3	Лабораторная работа №3. Моделирование транспортных свойств ионных расплавов методом МД	4
Модуль 2. Метод Монте-Карло		
1	Лабораторная работа №4. Моделирование структуры ионных расплавов методом МК	4

2	Лабораторная работа №5. Моделирование транспортных свойств ионных расплавов методом МК	4
---	--	---

5. Образовательные технологии

В курсе по направлению подготовки специалистов широко используются в учебном процессе компьютерные программы, различные методики в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся. В соответствии с требованиями ФГОС предусматривается использование при проведении занятий следующих активных методов обучения:

- самостоятельное изучение теоретического материала;
- подготовка к лабораторным работам;
- оформление результатов лабораторной работы;
- подготовка к промежуточному контролю;
- подготовка к зачету.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

6.1. Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Подготовка к отчетам по лабораторным работам.
3. Решение задач.
4. Подготовка к коллоквиуму.
5. Подготовка к зачету.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методическое обеспечение
1	Изучение рекомендованной литературы	Устный опрос по разделам дисциплины	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
2	Подготовка к отчетам по лабораторным работам	Проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале и проработки вопросов к текущей теме по рекомендованной литературе	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
3	Решение задач	Проверка домашнего задания	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
4	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
5	Подготовка к зачету	Устный опрос, компьютерное тестирование либо	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа

1. Текущий контроль: подготовка к отчетам по лабораторным работам.
2. Текущий контроль: решение задач.
3. Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.

Текущий контроль успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу лабораторных занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Результаты устного опроса учитываются при выборе индивидуальных задач для решения. Каждую

неделю осуществляется проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале.

Промежуточный контроль проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

Итоговый контроль проводится либо в виде устного экзамена, либо в форме тестирования.

Оценка «отлично» ставится за уверенное владение материалом курса.

Оценка «хорошо» ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале.

Оценка «удовлетворительно» ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса.

Оценка «неудовлетворительно» ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.1. Типовые контрольные задания

Перечень примерных контрольных вопросов к зачету

1. Вычисление средних по ансамблю и термодинамических величин.
2. Классические уравнения движения и методы интегрирования.
3. Алгоритм Верле. Метод «предсказаний и поправок».
4. Метод средней точки. Прыжковый метод. Метод Эйлера-Рундсона.
5. Модель парных потенциалов. Потенциал Леннарда-Джонса. Недостатки парных потенциалов.
6. Многочастичные потенциалы для металлов (EAM).
7. Многочастичные потенциалы для полупроводников. Универсальный метод (MEAM).
8. Дальнодействующие силы.
9. Способы контроля внешних параметров при использовании метода МД.
10. Молекулярная динамика Эренфеста.
11. Молекулярная динамика Борна-Оппенгеймера.
12. Молекулярная динамика Кара-Паринелло.
13. Проблема выбора метода. Силы в «первопринципных» молекулярно-динамических расчетах.
14. Теория функционала электронной плотности.
15. Простые термодинамические средние. Структурные свойства.
16. Временные корреляционные функции и коэффициенты переноса.

Формы контроля и критерии оценок

Формы контроля: текущий контроль (систематический учет знаний и активность студентов на занятиях), промежуточный контроль по модулю (рубежная контрольная работа по пройденному блоку тем) и итоговой контроль (экзамен). Текущий контроль осуществляется в виде устного опроса, тестирования, проведения коллоквиума, обсуждения реферата, проверки домашнего задания.

Оценка текущего контроля включает 70 баллов:

- допуск к выполнению лабораторных работ (10 баллов);

- выполнение и сдача лабораторных работ (20 баллов);
- тестирование (10 баллов);
- выполнение контрольной работы (с включением задач) – 20 баллов.

Промежуточный контроль (в виде контрольной работы или коллоквиума) оценивается в 30 баллов.

Итоговый контроль (100 баллов) проводится в виде устного собеседования или в виде письменного теста, содержащего вопросы по всем разделам курса «Методы компьютерного моделирования физико-химических процессов и сложных термодинамических систем», изучавшим в процессе семестра. Среднее число баллов по всем модулям, которое дает право получения положительной оценки без итогового контроля знаний – 51 и выше.

Примерная тематика рефератов

1. История развития метода молекулярной динамики.
2. История развития метода Монте-Карло.
3. Применение метода Монте-Карло для вычисления интегралов.
4. Молекулярная динамика белков.
5. Мультифизическое моделирование с помощью пакета COMSOL Multiphysics.

7.2. Методические материалы, определяющие процедуру оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Общий результат выводится как интегральная оценка, складывающаяся из текущего контроля – 70% и промежуточного контроля – 30%.

Текущий контроль по дисциплине включает:

- посещение занятий – 5 баллов;
- участие на практических занятиях – 7 баллов;
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ – 35 баллов.

Промежуточный контроль по дисциплине включает:

- устный опрос – 30 баллов;
- письменная контрольная работа – 30 баллов;
- тестирование – 30 баллов.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) основная литература:

1. Юрчук, С.Ю. Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур. Моделирование наносистем методами молекулярной динамики: курс лекций / С.Ю. Юрчук. – Москва: Издательский Дом МИСиС, 2013. – 47 с. – ISBN 978-5-87623-663-0. – Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS: [сайт]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru/56067.html> (дата обращения: 25.02.2020).

2. Гулд Х. Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Том 1. – М.: Мир, 1990. – 349 с.

3. Гулд Х. Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Том 2. – М.: Мир, 1990. – 399 с.

4. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. – М.: СОЛОН-Пресс, 2005. – 536 с.

б) дополнительная литература:

1. Кручинин, Н.Ю. Метод молекулярной динамики при изучении структуры и конформационной динамики макромолекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах: учебное пособие / Н.Ю. Кручинин. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2015. – 108 с. – ISBN 978-5-7410-1241-3. – Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS: [сайт]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru/54125.html> (дата обращения: 25.02.2020).

2. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. – М.: СОЛОН-Пресс, 2011. – 224 с.

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: электронная библиотека / Науч. электрон. б-ка. – Москва, 1999. – Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp> (дата обращения: 21.10.2019). – Яз. рус., англ.

2. Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный ресурс]: база данных содержит сведения обо всех видах литературы, поступающих в фонд НБ ДГУ / Дагестанский гос. ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>, свободный (дата обращения: 21.10.2019).

3. ЭБС iprbook.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31168.html> (дата обращения: 21.10.2019).

10. Методические указания для обучающихся студентов по освоению дисциплины

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Методические указания должны мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- глоссарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций;
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и про-

анализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой;
- поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- литературный поиск, используя онлайн поисковую систему NIST/TRC;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций ситуации;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине «Методы компьютерного моделирования физико-химических процессов и сложных термодинамических систем» используются следующие информационные технологии:

- занятия компьютерного тестирования;
- демонстрационный материал применением проектора;
- компьютерные программы для статистической обработки результатов анализа;
- программы пакета Microsoft Office.

12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

В соответствии с требованиями ФГОС ВО кафедра имеет специально оборудованную учебную аудиторию для проведения лекционных занятий, которая укомплектована техническими средствами обучения (экран настенный с электроприводом и дистанцион-

ным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком). Имеются лаборатории с необходимым оборудованием и реактивами.