

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Компьютерное моделирование воды и водных растворов

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Физическая химия

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Компьютерное моделирование воды и водных растворов**

2. Уровень высшего образования – **специалитет.**

3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-1.С. Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения
СПК-1.С. Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	Знать: теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ Уметь: оценить возможные источники ошибок при изучении систем различной природы с помощью инструментальных методов физической химии Уметь: применить теоретические основы современных физико-химических методов при анализе и представлении материала научного сообщения на заданную тему Владеть: навыками статистической обработки данных физико-химического эксперимента
СПК-4.С. Способность использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области физической химии	Знать: возможности и ограничения методов компьютерного моделирования при решении практических задач Владеть: навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов интернета; основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации при решении физико-химических задач
СПК-5.С. Способность проводить молекулярно-динамические расчеты с использованием современных программных комплексов и баз данных	Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных молекулярно-динамических расчетов Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для физико-химического моделирования систем разной природы

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 32 часа составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: основы структурной химии (например, в объеме базового курса "Кристаллохимия").

Уметь: формулировать и решать конкретные задачи на основе усвоенных законов и закономерностей, проводить математическую обработку данных, обобщать полученные результаты.

Владеть: навыками поиска необходимых данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных).

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Подходы, используемые при описании строения воды и	8	4	0	0	0	0	4	0	4	4

водных растворов. Аналогии со строением близких по составу кристаллов										
Тема 2. Основы методов компьютерного моделирования	12	4	0	0	0	0	4	0	8	8
Тема 3. Потенциалы, используемые при моделировании строения воды и водных растворов	6	2	0	0	0	0	2	0	4	4
Тема 4. Программы, используемые для компьютерного моделирования	18	2	10	0	0	0	12	0	6	6
Тема 5. Результаты, полученные при изучении конкретных систем	26	6	8	2	0	0	16	0	10	10
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			
Итого	72	18	18	2		2	40			32

9. Образовательные технологии:

- использование компьютерных программ, обработка данных на компьютерах;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Программа курса, список литературы по каждой теме.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Френкель Д., Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям. Пер. с англ. и науч. ред. Иванов В.А., Стукан М.Р. М.: Научный мир, 2013. 578 с. ISBN 978-5-91522-223-5.
2. Вода: структура, состояние, сольватация. Достижения последних лет. Кесслер Ю.М., Петренко В.Е., Лященко А.К. и др. Отв. ред. Кутепов А.М. М.: Наука, 2003. 404 с. ISBN 5-02-006485-8.

Дополнительная литература

1. Маленков Г.Г. Структура и динамика жидкой воды. Журн. структ. химии, **2006**, 47(Приложение), S5–S35.
2. Гринева О.В. Супрамолекулярные мотивы в жидкостях. Водные растворы веществ. Журн. структ. химии, **2006**, 47(1), 185–191.
3. Falk M., Knop O. Water in Stoichiometric Hydrates. In Water: a comprehensive treatise. Vol. 2. Ed. Franks F. N.Y., L.: Plenum Press, **1973**. P. 55–113. ISBN 978-1-4757-6960-9 doi: 10.1007/978-1-4757-6958-6.
4. Water: a comprehensive treatise. Vol. 6. Recent advances. Ed. Franks F. N.Y., L.: Plenum Press, **1979**. 455 p. ISBN 978-1-4684-8020-7 doi: 10.1007/978-1-4684-8018-4.

Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):

Персональный компьютер и мультимедийный проектор для демонстрации презентаций.

Персональные компьютеры с установленной программой для молекулярно-динамического моделирования (например, LAMMPS). LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. <https://lammps.sandia.gov/>

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

в.н.с., к.х.н., Гринева Ольга Витальевна, кафедра физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, ovg@phys.chem.msu.ru, 8-495-939-42-78

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Вопросы для зачета

1. Подходы, используемые при описании строения воды и водных растворов.
2. Краткая характеристика методов компьютерного моделирования.
3. Потенциалы, используемые при моделировании строения воды и водных растворов.
4. Основы работы с одной из программ для компьютерного моделирования.
5. Методика и результаты применения методов компьютерного моделирование для изучения строения одной из водных систем, рассмотренных в курсе.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ; возможности и ограничения методов компьютерного моделирования при решении практических задач;	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы; Уметь: самостоятельно составлять план исследования; Уметь: оценить возможные источники ошибок при изучении систем различной природы с помощью инструментальных методов физической химии; применить теоретические основы современных физико-химических методов при анализе и представлении материала научного сообщения на заданную тему; Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных молекулярно-динамических расчетов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной	мероприятия текущего контроля

<p>информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения;</p> <p>Владеть: навыками статистической обработки данных физико-химического эксперимента;</p> <p>Владеть: навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов интернета; основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации при решении физико-химических задач;</p> <p>Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для физико-химического моделирования систем разной природы</p>	успеваемости, устный опрос на зачете
---	--------------------------------------