

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет
(назва факультету)

Кафедра молекулярної фізики



«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Заступник декана
з навчальної роботи

« 30 » серпня 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА
НАВЧАЛЬНА ПРАКТИКА ЗА ФАХОМ

(повна назва навчальної дисципліни)

для студентів

галузь знань	<u>10 Природничі науки</u> (шифр і назва)
спеціальність	<u>104 Фізика та астрономія</u> (шифр і назва спеціальності)
освітній рівень	<u>бакалавр</u> (молодший бакалавр, бакалавр, магістр)
освітня програма	<u>Фізика</u> (назва освітньої програми)
вид дисципліни	<u>обов'язкова</u>
Форма навчання	<u>очна</u>
Навчальний рік	<u>2022/2023</u>
Семестр	<u>6</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>3</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>диференційований залік</u>

Викладачі: асистент Бур'ян Сергій Анатолійович

асистент Британ Андрій Васильович

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» ____ 20__р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» ____ 20__р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» ____ 20__р.
(підпис, ПІБ, дата)

Розробники: Бур'ян Сергій Анатолійович, канд. фіз.-мат. наук,
асистент кафедри молекулярної фізики
(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри _____

(підпис)

(Булавін Л.А.)

(прізвище та ініціали)

Протокол № 12 від «19» квітня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 11 від «10» сервня 2022 року

Голова науково-методичної комісії _____

(підпис)

(прізвище та ініціали)

(Оліх О.Я.)

« 10 » сервня 2022 року

ВСТУП

1. Мета дисципліни полягає в ознайомленні та оволодінні певними підходами, прийомами, методиками проведення наукового комп'ютерного експерименту, набутті відповідних навичок роботи з конкретними програмними пакетами, обробки та інтерпретації результатів чисельних розрахунків, трансформації теоретичного знання в практичні навички та вміння, необхідні для проведення наукових досліджень.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати матеріал курсів з фахових дисциплін (ОК1, 2, 4-6, 10, 17, 18, 21, 25, 35).
2. Вміти застосовувати попередні знання з фахових дисциплін для теоретичних досліджень та обрахунку експериментальних результатів дослідження.

3. Анотація навчальної дисципліни / референс:

Мета практики полягає в ознайомленні та оволодінні деякими підходами, прийомами, методиками проведення наукового комп'ютерного експерименту, набутті відповідних навичок роботи з конкретними програмними пакетами, обробки та інтерпретації результатів чисельних розрахунків, трансформації теоретичного знання в практичні навички та вміння, необхідні для проведення наукових досліджень. Визначена мета конкретизується у наступних завданнях: формування знань про принципи проведення конкретного комп'ютерного експерименту, ознайомлення та набуття практичних навичок з конкретного чисельного методу дослідження в галузі фундаментальної медичної фізики, набуття практичних навичок роботи з конкретним програмним пакетом, формування вміння кількісно обробляти та аналізувати результати чисельних розрахунків в галузі фундаментальної медичною фізики.

Отримані знання та вміння необхідні для виконання кваліфікаційних робіт бакалавра та в подальших наукових дослідженнях за допомогою опанованих на практиці методик. Від якості проходження практики, результатів отриманих під час її виконання, залежить подальше виконання бакалаврської роботи, вибір місця його виконання та оцінка професійної діяльності. Результатом навчання є: знання про принципи проведення конкретного комп'ютерного експерименту для дослідження фізичних явища в галузі фундаментальної медичної фізики, вміння працювати з науковою літературою за темою досліджень, в тому числі з інтернет джерелами, практичні навички роботи з інтеграції конкретних програмних пакетів з операційною системою, практичні навички роботи з конкретними програмними пакетами для наукових досліджень в галузі фундаментальної медичної фізики, вміння кількісно обробляти та аналізувати результати комп'ютерного експерименту в галузі фундаментальної медичної фізики, вміння формулювати висновки за результатами досліджень та презентувати їх.

Навчальна практика за фахом проводиться влітку після закінчення 3-го року навчання впродовж 4 тижнів (5 днів на тиждень, 6 годин на день). Місце проведення – кафедра молекулярної фізики фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Загальне керівництво практикою здійснює декан фізичного факультету та завідувачі кафедрами. Декан та завідувачі кафедрами призначають безпосередніх керівників практики від кафедр.

Завдання (навчальні цілі)

- формування знань про принципи проведення конкретного комп'ютерного експерименту;
- ознайомлення та набуття практичних навичок з конкретного чисельного методу дослідження в галузі фундаментальної медичної фізики;
- набуття практичних навичок роботи з конкретним програмним пакетом;
- формування вміння кількісно обробляти та аналізувати результати чисельних розрахунків в галузі фундаментальної медичною фізики.

Згідно вимог Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Фізика», спеціальність 104 «Фізика та астрономія»), ОПП «Фізика» дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних компетентностей:

Інтегральних:

Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики та астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та астрономії і характеризується комплексністю та невизначеністю умов.

Загальних:

- ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях
- ЗК4. Здатність бути критичним і самокритичним.
- ЗК5. Здатність приймати обґрунтовані рішення.
- ЗК6. Навички міжособистісної взаємодії.
- ЗК7. Навички здійснення безпечної діяльності.
- ЗК9. Визначеність і наполегливість щодо поставлених завдань і взятих обов'язків.
- ЗК10. Прагнення до збереження навколишнього середовища.
- ЗК11. Здатність діяти соціально відповідально та свідомо.

Спеціальних:

- ФК1. Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії.
- ФК2. Здатність використовувати на практиці базові знання з математики як математичного апарату фізики і астрономії при вивченні та дослідженні фізичних та астрономічних явищ і процесів.
- ФК3. Здатність оцінювати порядок величин у різних дослідженнях, так само як точності та значимості результатів.
- ФК4. Здатність працювати із науковим обладнанням та вимірювальними приладами, обробляти та аналізувати результати досліджень.
- ФК5. Здатність виконувати обчислювальні експерименти, використовувати чисельні методи для розв'язування фізичних та астрономічних задач і моделювання фізичних систем.
- ФК6. Здатність моделювати фізичні системи та астрономічні явища і процеси.
- ФК7. Здатність використовувати базові знання з фізики та астрономії для розуміння будови та поведінки природних і штучних об'єктів, законів існування та еволюції Всесвіту.
- ФК8. Здатність виконувати теоретичні та експериментальні дослідження автономно та у складі наукової групи.
- ФК9. Здатність працювати з джерелами навчальної та наукової інформації.
- ФК10. Здатність самостійно навчатися і опановувати нові знання з фізики, астрономії та суміжних галузей.
- ФК15. Здатність аналізувати світові тренди розвитку фізики та астрономії для вибору власної освітньої траєкторії навчання та тематики майбутніх наукових досліджень

5. Результати навчання за дисципліною: (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

<i>Результат навчання</i> (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація *; 4. автономність та відповідальність*)		<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
Код	Результат навчання			
1.1	Знання про принципи проведення конкретного комп'ютерного експерименту для дослідження фізичних явищ в галузі фундаментальної медичної фізики.	Консультації, самостійне навчання, доповідь і обговорення вивченого матеріалу.	Захист звіту з практики, презентації результатів виконаних завдань на засіданні кафедри, диференційований залік	25
2.1	Вміння працювати з науковою літературою за темою досліджень, в тому числі з інтернет-джерелами.	Консультації, самостійне навчання, доповідь і обговорення вивченого матеріалу.	Захист звіту з практики, презентації результатів виконаних завдань на засіданні кафедри, диференційований залік	15
2.2	Практичні навички роботи з інтеграції конкретних програмних пакетів з операційною системою.	Консультації, самостійне навчання, доповідь і обговорення вивченого матеріалу.	Захист звіту з практики, презентації результатів виконаних завдань на засіданні кафедри, диференційований залік	15
2.3	Практичні навички роботи з конкретними програмними пакетами для наукових досліджень в галузі фундаментальної медичної фізики.	Консультації, самостійне навчання, доповідь і обговорення вивченого матеріалу.	Захист звіту з практики, презентації результатів виконаних завдань на засіданні кафедри, диференційований залік	15
2.4	Вміння кількісно обробляти та аналізувати результати комп'ютерного експерименту в галузі фундаментальної медичної фізики.	Консультації, самостійне навчання, доповідь і обговорення вивченого матеріалу.	Захист звіту з практики, презентації результатів виконаних завдань на засіданні кафедри,	15

* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

			диференційований залік	
2.5	Вміння формулювати висновки за результатами досліджень та презентувати їх.	Консультації, самостійне навчання, доповідь і обговорення вивченого матеріалу.	Захист звіту з практики, презентації результатів виконаних завдань на засіданні кафедри, диференційований залік	15

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання
(необов'язково для вибіркових дисциплін)

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни					
	1.1	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5
ПРН1. Знати, розуміти та вміти застосовувати основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних 8 фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики та астрономії.					+	+
ПРН3. Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій.					+	+
ПРН4. Вміти застосовувати базові математичні знання, які використовуються у фізиці та астрономії: з аналітичної геометрії, лінійної алгебри, математичного аналізу, диференціальних та інтегральних рівнянь, теорії ймовірностей та математичної статистики, теорії груп, методів математичної фізики, теорії функцій комплексної змінної, математичного моделювання.					+	
ПРН6. Оцінювати вплив новітніх відкриттів на розвиток сучасної фізики та астрономії.						+
ПРН7. Розуміти, аналізувати і пояснювати нові наукові результати, одержані у ході проведення фізичних та астрономічних досліджень відповідно до спеціалізації.					+	+
ПРН8. Мати базові навички самостійного навчання: вміти відшукувати потрібну інформацію в друкованих та електронних джерелах, аналізувати, систематизувати, розуміти, тлумачити та використовувати її для вирішення наукових і прикладних завдань.		+				
ПРН9. Мати базові навички проведення теоретичних та/або експериментальних наукових досліджень з окремих спеціальних розділів фізики або астрономії, що виконуються індивідуально (автономно) та/або у складі наукової групи.	+					

ПРН10. Вміти планувати дослідження, обирати оптимальні методи та засоби досягнення мети дослідження, знаходити шляхи розв'язання наукових завдань та вдосконалення застосованих методів.	+					
ПРН11. Вміти упорядковувати, тлумачити та узагальнювати одержані наукові та практичні результати, робити висновки.					+	+
ПРН12. Вміти представляти одержані наукові результати, брати участь у дискусіях стосовно змісту і результатів власного наукового дослідження.						+
ПРН13. Розуміти зв'язок фізики та астрономії з іншими природничими та інженерними науками, бути обізнаним з окремими (відповідно до спеціалізації) основними поняттями прикладної фізики, матеріалознавства, інженерії, хімії, біології тощо, а також з окремими об'єктами (технологічними процесами) та природними явищами, що є предметом дослідження інших наук і, водночас, можуть бути предметами фізичних або астрономічних досліджень.	+				+	
ПРН14. Знати і розуміти основні вимоги техніки безпеки при проведенні експериментальних досліджень, зокрема правила роботи з певними видами обладнання та речовинами, правила захисту персоналу від дії різноманітних чинників, небезпечних для здоров'я людини.				+		
ПРН18. Володіти державною та іноземною мовами на рівні, достатньому для усного і письмового професійного спілкування та презентації результатів власних досліджень.		+	+	+		
ПРН26. Мати базові навички самостійної оцінки рівня освітніх програм з фізики та астрономії у глобальному освітньому просторі для вибору цілеспрямованих візитів по програмі академічної мобільності.	+	+				
ПРН27. Мати базові навички самостійної оцінки рівня освітніх програм із природничих наук в Україні і світі для їх вибіркового опанування в рамках міждисциплінарного шляху розвитку науки.		+				
ПРН28. Мати уявлення про трансдисциплінарний шлях розвитку науки та його значення для вибору майбутньої освітньої траєкторії				+	+	

7. Схема формування оцінки:

7.1.Форми оцінювання студентів:

В кінці практики кожний студент подає на кафедру заповнений щоденник (додаток А) та надрукований або написаний від руки з урахуванням державних стандартів звіт. В ньому повинна бути коротко і конкретно описана робота, особисто виконана студентом. В звіті має бути представлений перелік цитування літературних джерел. Складений студентом звіт повинен мати наскрізну нумерацію сторінок, аркуші звіту повинні бути з'єднані.

Звіт перевіряється керівниками практики і затверджується завідувачем кафедри.

По закінченню практики студенти захищають звіт в присутності комісії, призначеної завідувачем кафедри. До складу комісії входять керівники практики від навчального закладу і, по можливості, від баз практики, викладачі кафедри, які викладали практикантам спеціальні дисципліни. Остаточне рішення затверджується на засіданні кафедри. Практика має

диференційований залік і оцінка заноситься у залікову книжку за підписом безпосереднього керівника від кафедри.

Звіт практиканта повинен відображати повний об'єм роботи про навчальну практику, давати повне уявлення про виконану ним роботу та її результати, а також перелік вивченої основної та додаткової літератури.

Оцінка за роботу практиканта формується за такою схемою:

1. Робота з технічною документацією програмних пакетів. (10 балів).
2. Проведення комп'ютерного експерименту (60 балів).
3. Оформлення щоденника та звіту навчальної практики за фахом (10 балів).

Підсумкове оцінювання здійснюється у формі диференційованого заліку (20 балів).

	Бали за семестр	Диференційований залік	Підсумкова оцінка
<i>Мінімум</i>	50	10	60
Максимум	80	20	100

Студент не допускається до заліку, якщо під час семестру набрав менше **50 балів**.

Оцінка за залік не може бути меншою **10 балів** для отримання загальної позитивної оцінки за курс. Студенту, який не виконав програму практики без поважних причин, може бути надано право на проходження практики повторно при виконанні умов, визначених навчальним закладом. Студент, який в останнє отримав негативну оцінку з практики в комісії, відраховується з навчального закладу.

7.2. Організація оцінювання: (обов'язково зазначається порядок організації передбачених робочою навчальною програмою форм оцінювання із зазначенням, у тому числі, результатів навчання, опанування яких перевіряється конкретним оцінюванням).

Рівень досягнення запланованих результатів навчання визначається за результатами написання та захисту звітів з практики.

Питома вага результатів навчання у підсумковій оцінці за умови її опанування на належному рівні:

- результати навчання 1.1 (знання) – до 25%;
- результати навчання 2.1 (вміння) – до 15%;
- результати навчання 2.2 (вміння) – до 15%;
- результати навчання 2.3 (вміння) – до 15%;
- результати навчання 2.4 (вміння) – до 15%;
- результати навчання 2.5 (вміння) – до 15%.

Шкала відповідності

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно з можливістю повторного складання / Fail	35-59
Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни / Fail	0-34

**СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН НАВЧАЛЬНОЇ ПРАКТИКИ ЗА ФАХОМ**

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
1	Ознайомлення з основними нормативними документами, що визначають правила внутрішнього трудового розпорядку, правила охорони праці та техніки безпеки, пожежної безпеки у Київському національному університеті імені Тараса Шевченка.			2
2	Ознайомлення з основними ідеями та теоретичними засадами методу молекулярної динаміки.			8
3	Ознайомлення з технічною документацією програмного пакету			5
4	Встановлення програмного забезпечення – короткий огляд необхідного програмного забезпечення.			5
5	Вхідний сценарій LAMMPS – опис вхідного файлу LAMMPS і його основних команд.			5
6	Візуалізація траєкторій – візуалізація атомів і траєкторій за допомогою VMD, OVITO.			5
7	Удосконалення сценарію LAMMPS. До кращих і трохи досконаліших сценаріїв LAMMPS.			5
8	Перезапуск із збереженої конфігурації – збереження конфігурації та використання її як нової початкової точки.			5
9	Моделювання Броунівського руху.			5
10	Моделювання явища дифузії			5
11	Моделювання атомарних систем у різних агрегатних станах. Розрахунок температури, густини, радіальної функції розподілу, діаграм Вороного, компонент тензора механічних напружень на прикладі простих флюїдів.			5
	Моделювання атомарних систем з в обмеженому просторі та з межею поділу фаз та розрахунок міжфазних термодинамічних характеристик.			5
12	Моделювання фізичної системи з осмотичним потоком через пористу мембрану. Бінарна рідина Леннарда-Джонса протікає через жорстку пористу мембрану.			5
13	Моделювання нанообмеженого електроліту. Молекулярно-динамічне моделювання водного розчину NaCl, обмеженого між двома твердими стінками.			5
14	Обробка, графічне представлення та аналіз отриманих результатів молекулярно-динамічних розрахунків.			10
15	Заповнення щоденника та написання звіту з навчальної практики за фахом.			10
	ВСЬОГО			90

Загальний обсяг 90 год, в тому числі:

Лекцій – **0 год**.

Практичні заняття – **0 год**.

Лабораторні заняття – **0 год**.

Самостійна робота – **год**.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

Основна: (Базова)

1. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator: [сайт] – URL: <https://www.lammps.org>.
2. OVITO Open Visualization Tool: офіційний сайт. – URL: <https://www.ovito.org>.
3. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, S. J. Plimpton, *Comp Phys Comm*, 271 (2022) 10817. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>
4. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, S. Plimpton, *J Comp Phys*, 117, 1-19 (1995). <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
5. Simple molecular dynamics: [сайт] – URL: <https://lammpstutorials.github.io/index.html>.

Додаток А

Київський національний університет імені Тараса Шевченка
фізичний факультет

З В І Т

з навчальної практики за фахом
студента 3 курсу бакалаврату кафедри молекулярної фізики
освітньо-професійної програми “ФІЗИКА”

Науковий керівник практики

202_р.

“ЗАТВЕРДЖУЮ”
завідуючий кафедрою
Булавін Л.А.
“ _____ ” _____ 202_ р.

ІНДИВІДУАЛЬНИЙ ПЛАН-ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ПРАКТИКИ ЗА ФАХОМ

студента 3 курсу бакалаврату фізичного факультету
кафедри молекулярної фізики
освітньо-професійної програми “ФІЗИКА”

1. Керівник виробничої практики від кафедри

2. Науковий керівник практики

3. Місце проведення виробничої практики

4. Термін проведення виробничої практики
липень 2023 р.

кількість тижнів 4

кількість годин на тиждень 6

5. Тема дослідження

6. Завдання до навчальної практики за фахом:

Науковий керівник практики

(підпис)

ПЛАН РОБОТИ СТУДЕНТА—ПРАКТИКАНТА

№	Зміст роботи	Термін виконання	Відмітка про виконання

**ЩОДЕННИК
СТУДЕНТА-ПРАКТИКАНТА**

за період з _____ по _____ липня 2023 р.

Дата	Види роботи	Примітка