

СОГЛАСОВАНО

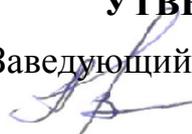
Руководитель ОПОП


_____ А.В. Великородов

«02» июня 2020 г.

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой ОНФХ


_____ А.В. Великородов

«04» июня 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ

Составители	Ковалев В.Б., доцент, к.х.н., доцент
Специальность	04.03.01 Химия
Направленность (профиль) ОПОП	«общий профиль»
Квалификация (степень)	бакалавр
Форма обучения	очно-заочное
Год приема	2020
Курс	1

Астрахань, 2020 г.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Целью освоения дисциплины является познакомить студентов с теоретическими основами компьютерной химии и ее возможностями.

1.2. Задачи дисциплины: научить студентов применению методов математического моделирования для решения химических задач.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина относится к общенаучному циклу (Б1.В.03), вариативная часть. Дисциплина встраивается в структуру ОПОП как с точки зрения преемственности содержания, так и с точки зрения непрерывности процесса формирования компетенций выпускника.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы следующие знания, умения, навыки, формируемые предшествующими дисциплинами: учебный курс логически связан с теоретическими основами и практическими навыками, полученными при изучении бакалаврами дисциплин «Физика».

Знания: фундаментальные разделы физики (механику, молекулярную физику и термодинамику, электродинамику и оптику, основы квантовой механики)

Умения: использовать теоретические знания при объяснении результатов химических экспериментов.

Навыки: освоить базовые принципы теории строения молекул, лежащие в основе современной теории связи физических и химических свойств молекул с их строением в основном и возбужденном состояниях.

«Информатика»

Знания: фундаментальные основы информатики и пользования вычислительной техникой.

Умения: использовать программное обеспечение компьютеров для планирования химических исследований, анализа результатов эксперимента и подготовки научных публикаций.

Навыки: методами расчетов свойств веществ по формулам статистической термодинамики и решения уравнений химической кинетики.

«Квантовая механика и квантовая химия».

Знания: основные приближения квантовой химии и принципы методов, используемых при расчетах электронной структуры, строения и реакционной способности химических соединений.

Умения: пользоваться современными представлениями квантовой химии для объяснения специфики поведения химических соединений и современным программным обеспечением расчетных методов квантовой химии.

Навыки: Понимать возможности использования расчетных результатов квантовой механики в статистической термодинамике, теории элементарного акта химических превращений, молекулярной спектроскопии и других разделах современной химии.

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- современные методы квантовой химии (теоретические основы методов молекулярной механики, молекулярной динамики и квантовой химии; о границах применимости различных методов компьютерной химии)

- стратегия органического синтеза (навыками решения поставленных химических задач с использованием знаний по компьютерной химии)

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих

компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

Универсальные компетенции

«Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде» УК-3,

Общепрофессиональные компетенции

«Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности» ОПК-5

**Таблица 1.
Декомпозиция результатов обучения**

Код компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
УК-3	ИУК-3.1.1 Определяет свою роль в социальном взаимодействии и командной работе, исходя из стратегии сотрудничества для достижения поставленной цели;	ИУК-3.2.1 Осуществляет обмен информацией, знаниями и опытом с членами команды, оценивает идеи других членов команды для достижения поставленной цели;	ИУК-3.3.1 При реализации своей роли в социальном взаимодействии и командной работе учитывает особенности поведения и интересы других участников; ИУК-3.3.2 Анализирует возможные последствия личных действий в социальном взаимодействии и командной работе, и с учетом этого строит продуктивное взаимодействие в коллективе;
ОПК-5	ИОПК-5.1.1. Принципы использования современных информационных технологий в профессиональной деятельности	ИОПК-5.2.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля;	ИОПК-5.3.1. Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет 4 зачетные единицы, в том числе 15 часа, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (из них 15 часов – лабораторные работы), и 129 часов – на самостоятельную работу обучающихся:

**Таблица 2.
Структура и содержание дисциплины**

№	Наименование раздела (темы)	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа (в часах)			Самостоят. работа		Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
1	Введение. Современные проблемы применения математических методов в химии.	2	1-3			3	-	25	Собеседование
2	Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стан-	2	4-6			3	-	26	Собеседование

	дартной номенклатуры; линейные формулы Висвиссера, кодирование в системе VIBIGON; таблицы смежности и матрицы связности.							
3	Применение ЭВМ для расчетов кинетических параметров. Программные пакеты ChemOffice, GAUSSIAN, HyperChem	2	7-9		3	-	26	Собеседование
4	Программные пакеты для решения химических задач, доступные в глобальных компьютерных сетях: PASS, GAMESS	2	10-12		3	-	26	Реферат
5	Экспертные системы, фреймы и семантические сети. Решение задач с применением ЭВМ на определение пути протекания химических реакций	2	13-15		3	-	26	Дискуссия
итого					15	-	129	Д.зачет

Условные обозначения:

Л – занятия лекционного типа; ПЗ – практические занятия, семинары,
ЛР – лабораторные работы; ГК – групповые консультации;

Таблица 3. Матрица соотношения тем учебной дисциплины и формируемых в них компетенций

Темы, разделы дисциплины	Кол-во часов	КОМПЕТЕНЦИИ		Σ общее количество компетенций
		УК-3	ОПК-5	
Введение. Современные проблемы применения математических методов в химии.	28		+	1
Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры; линейные формулы Висвиссера, кодирование в системе VIBIGON; таблицы смежности и матрицы связности.	29	+	+	2
Применение ЭВМ для расчетов кинетических параметров. Программные пакеты ChemOffice, GAUSSIAN, HyperChem	29	+	+	2
Программные пакеты для решения химических задач, доступные в глобальных компьютерных сетях: PASS, GAMESS	29	+	+	2
Экспертные системы, фреймы и семантические сети. Решение задач с применением ЭВМ на определение пути протекания химических реакций	29	+	+	2

Краткое содержание дисциплины

Теория информации и типичные информационные технологии. Компьютер, элементы программирования. Программное обеспечение. Особенности химических вычислений на ЭВМ. Базы данных и компьютерные сети. Компьютерный химический практикум.

Введение. Современные проблемы применения математических методов в химии. Тенденции развития вычислительной техники и ее применения для физико-химических исследований

Компьютерное моделирование в химии (органическая химия, неорганическая химия, физико-химические методы исследования, квантовая химия, физическая химия).

Применение различных пакетов прикладных программ. Компьютерное планирование органического синтеза (КПОС). Основные операции КПОС. Представление молекул. Компьютерное представление реакций. Ретросинтетический и синтетический подходы. Выбор пути синтеза в условиях КПОС. Стратегия и тактика. Дальнейшее развитие КПОС. Кинетика. Обработка кинетических данных. Моделирование в кинетике. Моделирование в химической технологии. Применение компьютеров в кристаллографии. Принципы и методы кристаллографии. Комплексы программ, применяемых в рентгеноструктурном анализе.

Использование пакетов прикладных программ в квантовой химии. Расчет структуры и энергии молекул. Расчеты по методу Хюккеля и его модификациям. Расчеты методами молекулярной механики. Полуэмпирические методы расчета. Программное обеспечение для обработки и анализа экспериментальных данных. Справочные системы по химии. Электронная периодическая система элементов.

Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры; линейные формулы Висвиссера, кодирование в системе VIBIGON; таблицы смежности и матрицы связности.

Расчетные методы компьютерной химии. Изучение термодинамических параметров химических соединений: концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул; метод молекулярной динамики (общие принципы); метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов; метод Монте-Карло, квантовые методы исследования.

Применение ЭВМ для расчетов кинетических параметров. Исследование механизмов протекания реакции: понятия о кинетических расчетах, планирование кинетических экспериментов, обратная задача химической кинетики (виды параметрической идентификации в зависимости от имеющихся представлений), метод решения обратной задачи химической кинетики (построение целевых функций).

Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований. Экспертные системы, фреймы и семантические сети.

Общие понятия о задаче корреляции структура- свойство и структура-активность. Методы корреляции, основанные на теории распознавания образов, регрессионных зависимостях и квантовых моделях молекул.

Математическое моделирование химико-технологических процессов. Решение прямой задачи химической кинетики.

5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

5.1. Указания по организации и проведению лекционных и практических занятий с перечнем учебно-методического обеспечения.

Практические занятия проводятся еженедельно в объеме 2 часа. По окончании изучения каждой темы студенты выполняют реферат, собеседование, дискуссию.

Перечень учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

1. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView [Электронный ресурс] / Бутырская Е.В. - М. : СОЛОН-ПРЕСС, 2011. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785913590954.html>

Перечень вопросов для самоподготовки

1. Метод молекулярной динамики.
2. Метод броуновской динамики.
3. Метод Монте-Карло.

4. Расширенный метод Хюккеля.
5. Визуализация молекулярных структур в ChemDraw и HyperChem.
6. Исходные положения квантовой механики (уравнение Шредингера).
7. Симметрия молекулярных систем.
8. Методология решения структурных задач с помощью баз данных.
9. Полуэмперическая теория молекулярных орбиталей.
10. Неэмперическая теория молекулярных орбиталей.
11. Геометрия молекулы: Z –матрица.

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Таблица 4.
Содержание самостоятельной работы обучающихся

Номер темы	Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
1	Исходные положения квантовой механики (уравнение Шредингера). Метод Монте-Карло	25	Собеседование
2.	Создание выборки молекул в программе VIBIGON. Исследование заданного свойства с помощью заданной выборки.	26	Собеседование
3	использование основных команд при построении и расчетах характеристик молекул в пакете программ HyperChem.	26	Собеседование
4	Состав аппаратного обеспечения GAMESS для молекулярного моделирования молекул, выбор технических средств и их основные характеристики. Состав программного обеспечения GAMESS для молекулярного моделирования молекул. Классификация программных средств. Основные сферы применения компьютерных технологий для молекулярного моделирования.	26	Реферат
5	Общие понятия о задаче корреляции структура- свойство и структура-активность. Методы корреляции, основанные на теории распознавания образов, регрессионных зависимостях и квантовых моделях молекул. Математическое моделирование химико-технологических процессов.	26	Дискуссия

5.3. Виды и формы письменных работ, предусмотренных при освоении дисциплины, выполняемые обучающимися самостоятельно.

Темы рефератов по дисциплине «Компьютерная химия» выбираются студентами в течение октября месяца и обсуждаются с преподавателем.

Требования к оформлению рефератов:

Реферат должен быть представлен в форме печатной работы (электронная версия обязательна) объемом **от 20 до 40 страниц**, созданный в редакторе MicrosoftWord (Windows), и сохранен в формате doc (docx), шрифт – TimesNewRoman; кегль – 14; межстрочный интервал – 1,0; абзац – 1,25; выравнивание по ширине, отступы: слева и справа – 2,5 см, сверху и снизу – 2,5 см, ориентация – книжная.

Оформление списка литературы к реферату:

1. Аршанский, Е.Я. Методика обучения химии в классах гуманитарного профиля [Текст] / Е.Я. Аршанский . – М.: Вентана-Граф, 2003. – 176 с.

2. Береснева, Е.В. Использование технологии критического мышления при изучении органической химии в средней школе [Текст] / Е.В. Береснева, Е.Н. Загвоздкина // Химия в школе. – 2008. – № 8. – С. 17–22.
3. Левитес, Д.Г. Школа для профессионалов или семь уроков для тех, кто учит / Д.Г. Левитес. – Воронеж: Издательство НПО «МОДЭК». – 2001. – 256 с.
4. Новые педагогические и информационные технологии в системе образования [Текст] / Е.С. Полат, М.Ю. Бухаркина, М.В. Моисеева, А.Е. Петров; под ред. Е.С. Полат. – М.: Издательский центр «Академия», 2008. – 272 с.
5. Храпов, С.А. Технологии CDIO в сфере социализации студентов (опыт Астраханского государственного университета) [Электронный ресурс]. / С.А. Храпов. – Режим доступа: http://portal.tpu.ru/f_dite/conf/2013/4/khrapov.pdf

Допускается самостоятельный выбор студентом темы реферата. Примерные темы рефератов:

1. Гетеросинтетический подход к коммуникативному планированию органического синтеза.
2. Иерархический подход к моделированию химико-технологических процессов.
3. Корреляция, структура, активность препарата на основе топологического подхода.
4. Корреляция, структура, активность препарата на основе физико-химических свойств (работа Гаммета).
5. Методы кибернетики в химической технологии.
6. Методы молекулярной динамики и оптимизации геометрии молекулы.
7. Методы численного эксперимента.
8. Моделирование химической кинетики. Решение обратной задачи.
9. Неэмпирические и полуэмпирические квантовые методы. Расчеты геометрии и энергии молекул.
10. Планирование эксперимента и получение статической информации в исследовании.
11. Применение современных пакетов программ для исследования термодинамических параметров биологически-активных соединений.
12. Распознавание образов в химии.
13. Расчет зависимости структура-свойство (биологическая активность) с помощью специализированных пакетов программ.
14. Современные математические методы обработки спектроскопической информации.
15. Современные пакеты программ, применяемые в химии.
16. Формальнологический подход к коммуникативному планированию органического синтеза.
17. Экспертные системы и искусственный интеллект в химической технологии.
18. Эмпирический подход к коммуникативному планированию органического синтеза.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Возможно применение электронного обучения и дистанционных образовательных технологий. В соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки реализация компетентностного подхода предусматривает использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий в объеме 16 ч. (из них 4 ч – дискуссии, 11 ч – собеседование, 3 ч. – рефераты) в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития требуемых компетенций обучающихся. В рамках учебного курса предусмотрены встречи с представителями российских и зарубежных компаний, государственных и общественных организаций, мастер-классы экспертов и специалистов.

6.1. Образовательные технологии

Название образовательной технологии	Темы, разделы дисциплины	Краткое описание применяемой технологии
Собеседование	Введение. Современные проблемы применения математических методов в химии.	Средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимися, на темы, связанные с изучаемой дисциплиной и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме.
	Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры; линейные формулы Висвиссера, кодирование в системе VIBIGON; таблицы смежности и матрицы связности.	
	Применение ЭВМ для расчетов кинетических параметров. Программные пакеты ChemOffice, GAUSSIAN, HyperChem	
Реферат	Программные пакеты для решения химических задач, доступные в глобальных компьютерных сетях: PASS, GAMESS	Продукт самостоятельной работы студента, представляющий собой краткое изложение в письменном виде полученных результатов теоретического анализа определенной научной (учебно-исследовательской) темы, где автор раскрывает суть исследуемой проблемы, приводит различные точки зрения, а также собственные взгляды на нее..
Дискуссия	Экспертные системы, фреймы и семантические сети. Решение задач с применением ЭВМ на определение пути протекания химических реакций	Обсуждается проблема, связанная с возможностью поиска нужной специализированной информации. Рассматриваются преимущества и недостатки поисковых систем и баз данных.

Учебные занятия по дисциплине могут проводиться с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) интерактивном взаимодействии обучающихся и преподавателя в режимах on-line и/или off-line в формах: видеолекций, лекций-презентаций, видеоконференции, собеседования в режиме чат, форума, чата, выполнения виртуальных практических и/или лабораторных работ и др.

6.2. Информационные технологии

Интернет-ресурсы www.asu.edu.ru (представлены учебно-методические материалы для усвоения студентами курса;

Электронный образовательный ресурс по курсу «Высокомолекулярные соединения», представленный на платформе moodle по адресу <http://moodle.asu.edu.ru>

Для оперативной связи со студентами предполагается возможность использования электронной почты преподавателя

6.3. Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

- лицензионное программное обеспечение:

Наименование программного обеспечения	Назначение
---------------------------------------	------------

Adobe Reader	Программа для просмотра электронных документов
Платформа дистанционного обучения LMS Moodle	Виртуальная обучающая среда
Mozilla FireFox	Браузер
Microsoft Office 2013, Microsoft Office Project 2013, Microsoft Office Visio 2013	Офисная программа
7-zip	Архиватор
Microsoft Windows 7 Professional	Операционная система
Kaspersky Endpoint Security	Средство антивирусной защиты

- современные профессиональные базы данных, информационные справочные системы:

1. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARKSQL НПО «Информ-систем». <https://library.asu.edu.ru>
2. Электронный каталог «Научные журналы АГУ»: <http://journal.asu.edu.ru/>
3. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО "ИВИС". <http://dlib.eastview.com> Имя пользователя: AstrGU Пароль: AstrGU
4. **Электронно-библиотечная** система elibrary. <http://elibrary.ru>
5. Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) - сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек. <http://mars.arbicon.ru>
6. Единое окно доступа к образовательным ресурсам <http://window.edu.ru>
7. Министерство науки и высшего образования Российской Федерации <https://minobrnauki.gov.ru/>

- перечень электронно-библиотечных систем (ЭБС):

1. **Электронная библиотека «Астраханский государственный университет»** собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех». <https://biblio.asu.edu.ru> Учетная запись образовательного портала АГУ
2. **Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента».** Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через сеть Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретенным на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог в настоящее время содержит около 15000 наименований www.studentlibrary.ru. Регистрация с компьютеров АГУ
3. **Электронная библиотечная система** издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги». www.biblio-online.ru

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

7.1. Паспорт фонда оценочных средств.

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Компьютерная химия» проверяется сформированность у обучающихся компетенций, указанных в разделе 3 настоящей программы. Этапность формирования данных компетенций в процессе освоения образовательной программы определяется последовательным освоением дисциплин и прохождением практик, а в процессе освоения дисциплины – последовательным достижением результатов освоения содержательно связанных между собой разделов, тем.

Таблица 5. Соответствие изучаемых разделов, результатов обучения и оценочных средств

№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины	Код контролируемой компетенции (компетенций)	Наименование оценочного средства
1	Введение. Современные проблемы применения математических методов в химии.	ОПК-5	Собеседование
2	Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры; линейные формулы Висвиссера, кодирование в системе BIBIGON; таблицы смежности и матрицы связности.	УК-3; ОПК-5	Собеседование
3	Применение ЭВМ для расчетов кинетических параметров. Программные пакеты ChemOffice, GAUSSIAN, HyperChem	УК-3; ОПК-5	Собеседование
4	Программные пакеты для решения химических задач, доступные в глобальных компьютерных сетях: PASS, GAMESS	УК-3; ОПК-5	Реферат
5	Экспертные системы, фреймы и семантические сети. Решение задач с применением ЭВМ на определение пути протекания химических реакций	УК-3; ОПК-5	Дискуссия

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания.

Таблица 6. Критерии оценивания результатов обучения

5 «отлично»	- выставляется студенту, если он демонстрирует глубокие знания теоретического и экспериментального материала и умеет обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы;
4 «хорошо»	- выставляется студенту, если он демонстрирует глубокие знания теоретического и экспериментального материала, однако, возможны единичные ошибки, исправляемые самим студентом после замечания преподавателя, умеет обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы;
3 «удовлетворительно»	- выставляется за неполное теоретическое и экспериментальное обоснование теоретического или экспериментального материала, требующее наводящих вопросов преподавателя;
2 «неудовлетворительно»	- выставляется студенту за полное отсутствие обоснования теоретического и экспериментального материала, имеются грубые ошибки при изложении материала.

Таблица 7

Показатели оценивания результатов обучения в виде умений и владений

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует отдельные, несистематизированные навыки, не способен применить знание теоретического материала при выполнении заданий, испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, выполняет задание при подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	не способен правильно выполнить задание

7.3. Контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Перечень вопросов для собеседования, дискуссии

1. Визуализация пространственной структуры молекул
2. Прогнозирование физико-химических свойств органических соединений на основании их химического строения экспериментально-статистическими методами.
3. Системы управления базами данных химической информации.
4. Элементы квантовой механики и теории строения молекул.
5. Исследование поверхности потенциальной энергии молекулярной системы.
6. Моделирование динамики молекулярных систем.
7. Метод молекулярных орбиталей. Неэмпирические методы.
8. Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы.
9. Вычисление потенциальной энергии атомно-молекулярной энергии атомно-молекулярной системы.
10. Молекулярная механика и молекулярная динамика в HyperChem.
11. Виды невалентных взаимодействий.
12. Влияние химического строения многоатомных молекул на энергию невалентных взаимодействий..
13. Моделирование динамики невалентных взаимодействий.
14. Метод молекулярной динамики.

15. Метод броуновской динамики.
16. Метод Монте-Карло.
17. Расширенный метод Хюккеля.
18. Визуализация молекулярных структур в ChemDraw и HyperChem.
19. Исходные положения квантовой механики (уравнение Шредингера).
20. Симметрия молекулярных систем.
21. Методология решения структурных задач с помощью баз данных.
22. Полуэмперическая теория молекулярных орбиталей.
23. Неэмперическая теория молекулярных орбиталей.
24. Геометрия молекулы: Z –матрица.

**7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности
СООТВЕТСТВИЕ ЭТАПОВ (УРОВНЕЙ) ОСВОЕНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ
ПЛАНИРУЕМЫМ РЕЗУЛЬТАТАМ ОБУЧЕНИЯ И КРИТЕРИЯМ ИХ ОЦЕНИВАНИЯ**

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения				
		1	2	3	4	5
УК-3 Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде						
Первый этап (уровень) способностью осуществлять взаимодействие в команде с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения, в том числе, в новых областях знаний, непосредственно не связанных со сферой деятельности	Владеть (УК-3): способами поиска пополнения профессиональных знаний на основе использования оригинальных источников, в том числе электронных и на иностранном языке, из разных областей общей и профессиональной культуры	Не владеет	Наличие существенных ошибок в знаниях об основных этапах и закономерностях развития химической науки и необходимости возникновения новых направлений	Демонстрирует владение не большой части знаний об основных этапах и закономерностях развития химической науки и необходимостью возникновения новых направлений	Демонстрирует владение основ знаний об основных этапах и закономерностях развития химической науки и необходимостью возникновения новых направлений	Способен не только владеть знаниями об основных этапах и закономерностях развития химической науки и необходимостью возникновения новых направлений, но и давать им критическую оценку

	Уметь (УК-3): находить современные информационные технологии в образовательную деятельность	Не умеет	Не способен самостоятельно находить знания об основных этапах и закономерностях развития химической науки и необходимостью возникновения новых направлений для реализации профессиональной деятельности	Демонстрирует умение находить знания об основных этапах и закономерностях развития химической науки и необходимостью возникновения новых направлений для реализации профессиональной деятельности	Демонстрирует умение не только находить знания об основных этапах и закономерностях развития химической науки и необходимостью возникновения новых направлений, но и давать им адекватную оценку	Демонстрирует умение находить знания об основных этапах и закономерностях развития химической науки и необходимостью возникновения новых направлений и применять ее для решения профессиональных задач
	Знать (УК-3): основные принципы поиска, обработки, анализа и оценки профессиональной информации	Не знает	Испытывает сложности со знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки и необходимости возникновения новых направлений	Демонстрирует знание большей части основных этапов и закономерностей развития химической науки и необходимости возникновения новых направлений	Демонстрирует знание основных этапов и закономерностей развития химической науки и необходимости возникновения новых направлений	Демонстрирует не только знание основных этапов и закономерностей развития химической науки и необходимости возникновения новых направлений, но и дает им критическую оценку

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения				
		1	2	3	4	5
ОПК-5 Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности						

Первый этап (уровень) способностью понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества	Владеть (VI ОПК-5): способами поиска пополнения профессиональных знаний на основе решения поставленных химических задач с использованием научно-технической информации и работы с информационными ресурсами	Не владеет	Наличие существенных ошибок в знаниях об основных этапах и закономерностях развития информационных технологий в химии и необходимости возникновения новых направлений	Демонстрирует владение не большой части знаний об основных этапах и закономерностях развития информационных технологий в химии и необходимостью возникновения новых направлений	Демонстрирует владение основ знаний об основных этапах и закономерностях информационных технологий в химии и необходимостью возникновения новых направлений	Способен не только владеть знаниями об основных этапах и закономерностях информационных технологий в химии и необходимостью возникновения новых направлений, но и давать им критическую оценку
	Уметь (VI ОПК-5): работать с научно-поисковыми системами, базами данных и оценивать качество информационных ресурсов	Не умеет	Не способен самостоятельно находить знания об основных этапах и закономерностях развития информационных технологий в химии и необходимостью возникновения новых направлений для реализации профессиональной деятельности	Демонстрирует умение находить знания об основных этапах и закономерностях развития информационных технологий в химии и необходимостью возникновения новых направлений для реализации профессиональной деятельности	Демонстрирует умение не только находить знания об основных этапах и закономерностях развития информационных технологий в химии и необходимостью возникновения новых направлений, но и давать им адекватную оценку	Демонстрирует умение находить знания об основных этапах и закономерностях развития информационных технологий в химии и необходимостью возникновения новых направлений и применять ее для решения профессиональных задач

	Знать (З1 ОПК-5): основные принципы использования современных информационных технологий в профессиональной деятельности	Не знает	Испытывает сложности со знанием основных этапов и закономерностей развития информационных технологий в химии и необходимости возникновения новых направлений	Демонстрирует знание большей части основных этапов и закономерностей развития информационных технологий в химии и необходимости возникновения новых направлений	Демонстрирует знание основных этапов и закономерностей развития информационных технологий в химии и необходимости возникновения новых направлений	Демонстрирует не только знание основных этапов и закономерностей развития информационных технологий в химии и необходимости возникновения новых направлений, но и дает им критическую оценку
<p>Второй этап (уровень)</p> <p>Использовать способность, понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные</p>	Владеть (В1 ОПК-5): навыками пополнения профессиональных знаний на основе решения поставленных химических задач с использованием научно-технической информации и работы с информационными ресурсами	Не владеет	Испытывает сложности во владении суммой представлений о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов информационных технологий в химии	Демонстрирует отдельные и не систематизированные представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов информационных технологий в химии	Уверенно демонстрирует представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов компьютерной химии	Уверенно демонстрирует представления не только о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов информационных технологий в химии, но и дает им критическую оценку
	Уметь (У1 ОПК-5): правильно работать с компьютерными программами, научно-поисковыми системами, базами данных и оценивать качество информационных ресурсов	Не умеет	Ограниченно применяет представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов информационных технологий в химии для реализации профессиональной деятельности	Частично применяет представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов информационных технологий в химии и для реализации профессиональной деятельности	Правильно применяет представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов информационных технологий в химии для реализации профессиональной деятельности	Правильно применяет представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов информационных технологий в химии для реализации профессиональной деятельности и дает им критическую оценку

	Знать (ЗП ОПК-5): основные типы современных информационных технологий, которые можно использовать для поиска и обработки профессиональной информации	Не знает	Не ориентируется в системе современных фундаментальных химических понятий и методологических аспектов информационных технологий в химии	Частично ориентируется в системе современных фундаментальных химических понятий и методологических аспектов информационных технологий в химии	Правильно использует систему современных фундаментальных химических понятий и методологических аспектов информационных технологий в химии в области профессиональной деятельности	Правильно использует систему современных фундаментальных химических понятий и методологических аспектов информационных технологий в химии при решении усложненных задач в сфере профессиональной деятельности
Третий этап (уровень) Активно применять приобретенные знания, понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны	Владеть (ВП ОПК-5): навыками решения поставленных химических задач с использованием знаний научно-технической информации и работы с информационными ресурсами	Не владеет	Испытывает сложности во владении системой знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков	Демонстрирует отдельные навыки по владению системой знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков	Уверенно демонстрирует навыки владения системой знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков	Уверенно демонстрирует навыки владения системой знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков в нетипичных ситуациях
	Уметь (УП ОПК-5): интегрировать компьютерные программы, работать с научно-поисковыми системами, базами данных и оценивать качество информационных ресурсов	Не умеет	Ограниченно применяет систему знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков в сфере профессиональной деятельности	Частично применяет систему знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков в сфере профессиональной деятельности	Правильно применяет систему знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков в сфере профессиональной деятельности	Правильно применяет систему знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков в сфере профессиональной деятельности и дает им критическую оценку

	<p>Знать (ЗШ ОПК-5): основные виды современных информационных технологий в профессиональной деятельности</p>	<p>Не знает</p>	<p>Не ориентируется в системе знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков</p>	<p>Частично ориентируется в системе знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков</p>	<p>Правильно использует систему знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков</p>	<p>Правильно использует систему знаний о формах и методах научного познания, их роли в общеобразовательной и профессиональной подготовке химиков при решении усложненных задач в сфере профессиональной деятельности</p>
--	---	-----------------	--	--	--	--

ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА

Дисциплина «Компьютерная химия»

Курс 1 семестр 2

Кафедра органической, неорганической и фармацевтической химии

Преподаватель – Ковалев В.Б.

Трудоемкость дисциплины - 144 часа (4 ЗЕ)

Число дидактических единиц 5

Максимальное количество баллов за работу в течение каждого семестра - 100 баллов

№ п/п	Контролируемые мероприятия	Максимальное количество баллов	Срок предоставления
Основной блок			
1	Введение. Современные проблемы применения математических методов в химии.	10	по расписанию
2	Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры; линейные формулы Висвисера, кодирование в системе VIBIGON; таблицы смежности и матрицы связности.	10	по расписанию
3	Применение ЭВМ для расчетов кинетических параметров. Программные пакеты ChemOffice, GAUSSIAN, HyperChem	10	по расписанию
4	Программные пакеты для решения химических задач, доступные в глобальных компьютерных сетях: PASS, GAMESS	10	по расписанию
5	Экспертные системы, фреймы и семантические сети. Решение задач с применением ЭВМ на определение пути протекания химических реакций	10	по расписанию
	Д.зачет	50	по расписанию
ВСЕГО		100	
Блок бонусов и штрафов			
10	Активность на занятии	10	
11	Невыполненный вовремя отчет	-1	
12	Пропуск без уважительной причины	-2	

Преподаватель, реализующий дисциплину (модуль), в зависимости от уровня подготовленности обучающихся может использовать иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература:

1. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView [Электронный ресурс] / Бутырская Е.В. - М. : СОЛОН-ПРЕСС, 2011. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785913590954.html>

б) дополнительная литература:

1. Соловьев М.Е. Компьютерная химия / Соловьев М.Е., Соловьев М.М. - М.: СОЛОН-Пресс, 2005. – 535 с.

в) перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимый для освоения дисциплины:

Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента». Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через сеть Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретенным на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог в настоящее время содержит около 15000 наименований. www.studentlibrary.ru. Регистрация с компьютеров АГУ.

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Аудиторный класс, наличие проектора для демонстрации наглядных пособий и экрана.

Компьютерный класс (10 компьютеров), лицензионное программное обеспечение, Internet.

Наличие в библиотечном фонде отечественной и зарубежной научно-популярной литературы по направлению подготовки (физика, химия). Наличие подборки научно-популярных и обзорных статей, рассчитанных на широкий круг читателей, по направлению подготовки как базового материала для подготовки выступлений студентов.

При необходимости рабочая программа дисциплины (модуля) может быть адаптирована для обеспечения образовательного процесса инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, в том числе для обучения с применением дистанционных образовательных технологий. Для этого требуется заявление студента (его законного представителя) и заключение психолого-медико-педагогической комиссии (ПМПК).