

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий



УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебной работе,
качеству образования – первый
проректор

Иванов А.Г.

« 30 » июня 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.04.02 КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ

Направление подготовки	04.04.01 Химия
Профиль подготовки	Органическая химия
Программа подготовки	академическая
Форма обучения	очная
Квалификация выпускника	магистр

Краснодар 2017

Рабочая программа дисциплины «Компьютерная химия» составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.04.01 Химия

Программу составил:

А.В. Беспалов, канд. хим. наук



Рабочая программа утверждена на заседании кафедры органической химии и технологий протокол № 17 от «07» июня 2017 г.

Заведующий кафедрой (разработчика) Доценко В.В.



Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры органической химии и технологий протокол № 17 от «07» июня 2017 г.

Заведующий кафедрой (выпускающей) Доценко В.В.



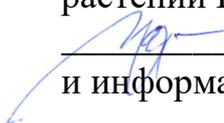
Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий протокол № 5 «27» июня 2017 г.

Председатель УМК факультета Стороженко Т.П.



Рецензенты:

 Дядюченко Л.В., канд. хим. наук, зав. лаб. регуляторов роста растений ГНУ ВНИИБЗР

 Буков Н.Н., д-р хим. наук, зав. каф. общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии КубГУ

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель дисциплины

Целью освоения дисциплины «Компьютерная химия» является изучение основных направлений применения компьютерных технологий в химии.

Программа предполагает самостоятельное изучение отдельных тем, анализ научной литературы, связанной с компьютерной химией и квантово-химическими расчетами. Решение задач обеспечивает закрепление изучаемого материала.

1.2 Задачи дисциплины

Задачи учебной дисциплины «Компьютерная химия» состоят в ознакомлении студентов с основными возможностями компьютерной химии, программами для химических расчетов и компьютерного моделирования, а также с химическими базами данных.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Компьютерная химия» относится к вариативной части и является дисциплиной по выбору студента.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих общепрофессиональных/профессиональных компетенций (ОПК/ПК):

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1.	ОПК-2	Владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации	основные направления применения компьютерных технологий в химических исследованиях и промышленной химии	осуществлять поиск научной и научно-технической информации при помощи специализированных систем компьютерного поиска	современными компьютерным и технологиями при планировании химических исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов
2.	ПК-2	Владением теорией и навыками практической		использовать прикладные программные	навыками применения компьютерных

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
		работы в избранной области химии		продукты и информационные ресурсы при решении экспериментальных и теоретических проблем в области химии	технологий в научных исследованиях, образовании, производственных секторах реальной экономики химического профиля
3.	ПК-4	Способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)		представлять результаты проделанной работы в виде текстовых отчетов, электронных презентаций и устных докладов с элементами научной дискуссии	навыками создания текстовых отчетов и электронных презентаций по результатам проделанной работы

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зач. ед. (144 часа), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры
		В
Контактная работа, в том числе:		
Аудиторные занятия (всего):	84	84
Занятия лекционного типа	28	28
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы, лабораторные работы, коллоквиумы и иные аналогичные занятия)	56	56
Иная контактная работа:		
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,3	0,3
Самостоятельная работа (всего), в том числе:	33	33
Оформление лабораторных работ	5	5
Изучение теоретического материала	8	8
Реферат	10	10
Подготовка к текущему контролю	10	10

Контроль:			
Подготовка к экзамену		26,7	26,7
Вид промежуточной аттестации (зачет, экзамен)			экзамен
Общая трудоемкость	час.	144	144
	в том числе контактная работа	84,3	84,3
	зач. ед.	4	4

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.
Разделы дисциплины, изучаемые в семестре В.

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1.	Предмет компьютерной химии	6	4			2
2.	Химические редакторы и базы данных	19		10	4	5
3.	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	40	6	8	16	10
4.	Обработка экспериментальных данных	26	6	4	8	8
5.	Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры	14	6	4		4
6.	Компьютерные технологии в обмене научной информацией	12	6	2		4
Итого по дисциплине:			28	28	28	33

2.3 Содержание разделов дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Предмет компьютерной химии	Предмет компьютерной химии. История ее возникновения	устный опрос
2.	Предмет компьютерной химии	Современный этап развития компьютерной химии. Когда и как должна использоваться вычислительная химия.	ЛР1, устный опрос

3.	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений.	ЛР2, решение задач, устный опрос
4.	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	Изучение свойств молекул при помощи методов компьютерной химии.	ЛР3, решение задач, устный опрос
5.	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	Методы квантовой химии и их использование для химического моделирования.	ЛР2, ЛР3, решение задач, устный опрос
6.	Обработка экспериментальных данных	Предварительный (разведочный) анализ. Погрешности прямых и косвенных измерений.	ЛР4, устный опрос
7.	Обработка экспериментальных данных	Исключение грубых промахов и систематических погрешностей. Построение статистической модели. Статистическая оценка гипотез	ЛР4, устный опрос
8.	Обработка экспериментальных данных	Метод наименьших квадратов. Аппроксимация экспериментальных данных непрерывными кривыми. Анализ сложных спектров.	ЛР4, решение задач, устный опрос
9.	Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры	Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры.	устный опрос
10.	Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры	Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей.	устный опрос
11.	Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры	Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований.	устный опрос
12.	Компьютерные технологии в обмене научной	Компьютерные технологии в обмене научной информацией.	устный опрос

	информацией		
13.	Компьютерные технологии в обмене научной информацией	Основные Интернет-ресурсы химического профиля, повышение эффективности доступа к ним.	устный опрос
14.	Компьютерные технологии в обмене научной информацией	Поиск, хранение и обработка химической информации. Особенности представления химической информации.	устный опрос

2.3.2 Занятия семинарского типа

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Химические редакторы и базы данных	Принципы графического изображения химических формул в органической химии.	ЛР1, устный опрос
2.	Химические редакторы и базы данных	Современные пакеты программ для изображения химических формул и уравнений реакций. Требования программ к операционным системам. Совместимость программ с Microsoft Office.	ЛР1, устный опрос
3.	Химические редакторы и базы данных	Специализированный программный комплекс ACD ChemSketch: назначение и возможности. Запуск программы, открытие файлов с разным расширением.	ЛР1, устный опрос
4.	Химические редакторы и базы данных	Пользовательский интерфейс программы. Обзор важнейших элементов главной и контрольной панелей.	ЛР1, устный опрос
5.	Химические редакторы и базы данных	Инструменты выделения и масштабирования, рисование мышью. Инструменты изображения связей и химических символов в программе ChemSketch.	ЛР1, устный опрос
6.	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	Преобразование структур: поворот, отображение, клонирование. Использование шаблонов. Написание схем химических реакций.	ЛР1, устный опрос
7.	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	Основные принципы расчета термодинамических характеристик и энергетических параметров молекул квантово-химическими методами.	ЛР2, ЛР3, решение задач, устный опрос

8.	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	Анализ результатов расчета натуральных валентных орбиталей и учет эффекта растворителя.	ЛР2, ЛР3, решение задач, устный опрос
9.	Математические методы компьютерного моделирования	Общие принципы выбора расчетной схемы и базисного набора для неэмпирических квантовых расчетов.	ЛР2, ЛР3, устный опрос
10.	Обработка экспериментальных данных	Принципы и методы компьютерной статистической обработки экспериментальных данных.	ЛР4, решение задач, устный опрос
11.	Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры	Основные принципы компьютерной обработки УФ- и ИК-спектров поглощения.	устный опрос
12.	Компьютерные технологии в обмене научной информацией	Знакомство с базами данных по спектроскопии и термодинамическим характеристикам соединений различных классов.	устный опрос
13.	-//-	Защита рефератов с коллективным обсуждением.	реферат
14.	-//-	Защита рефератов с коллективным обсуждением.	реферат

2.3.3 Лабораторные занятия

№	Наименование раздела	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Химические редакторы и базы данных	Построение химических формул и уравнений химических реакций	ЛР1
2.	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	Оптимизация геометрической структуры органических молекул	ЛР2
3.	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	Оптимизация геометрической структуры органических молекул	ЛР2
4.	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	Расчет свойств молекул при помощи квантово-химических методов	ЛР3
5.	Математические методы	Расчет свойств молекул при	ЛР3

	компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	помощи квантово-химических методов	
6.	Обработка экспериментальных данных	Статистическая обработка экспериментальных данных	ЛР4
7.	Обработка экспериментальных данных	Статистическая обработка экспериментальных данных	ЛР4

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовая работа не предусмотрена учебным планом

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1.	Изучение теоретического материала	1 Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.Г. Цирельсон. - Электрон. дан. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94104 . — Загл. с экрана. 2 Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург: Лань, 2017. - 428 с. - Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/92941 . - Загл. с экрана. 3 Вершинин, В.И. Компьютерная идентификация органических соединений [Текст] / В. И. Вершинин, Б. Г. Дерендяев, К. С. Лебедев; Рос. акад. наук, Сибирское отд-ние, Новосибирский ин-т органической химии им. Н. Н. Ворожцова, М-во образования Рос. Федерации, Омский гос. ун-т. - М.: Академкнига, 2002. - 197 с.
2.	Оформление лабораторных работ	1 Вершинин, В.И. Компьютерная идентификация органических соединений [Текст] / В. И. Вершинин, Б. Г. Дерендяев, К. С. Лебедев; Рос. акад. наук, Сибирское отд-ние, Новосибирский ин-т органической химии им. Н. Н. Ворожцова, М-во образования Рос. Федерации, Омский гос. ун-т. - М.: Академкнига, 2002. - 197 с.
3.	Реферат	1 Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.Г. Цирельсон. - Электрон. дан. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94104 . — Загл. с экрана. 2 Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург: Лань, 2017. - 428 с. - Режим доступа:

		https://e.lanbook.com/book/92941 . - Загл. с экрана.
4.	Подготовка к текущему контролю	<p>1 Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.Г. Цирельсон. - Электрон. дан. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94104. — Загл. с экрана.</p> <p>2 Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург: Лань, 2017. - 428 с. - Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/92941. - Загл. с экрана.</p> <p>3 Вершинин, В.И. Компьютерная идентификация органических соединений [Текст] / В. И. Вершинин, Б. Г. Дерендяев, К. С. Лебедев; Рос. акад. наук, Сибирское отд-ние, Новосибирский ин-т органической химии им. Н. Н. Ворожцова, М-во образования Рос. Федерации, Омский гос. ун-т. - М.: Академкнига, 2002. - 197 с.</p>

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

3. Образовательные технологии

Преподавание дисциплины «Компьютерная химия» предполагает следующие формы занятий в рамках традиционных образовательных технологий:

1. Информационная лекция.
2. Лабораторная работа.
3. Практическая работа - семинар (решение задач с коллективным обсуждением, индивидуальное выполнение студентами тестовых заданий).
4. Защита реферата (представление студентами своих реферативных работ в виде презентации и устного доклада, с последующим коллективным обсуждением представленного материала).

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

Вид занятий	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
Лекции	Лекция-диалог, проблемная лекция	4
Практические занятия	Дискуссия	8
Лабораторные работы	Работа в малых группах	8
Итого		20

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

1 Примеры вопросов и задач для коллективного решения в аудитории

1. Определите в π -электронном приближении заряд на атоме, порядок связи, индекс свободной валентности. Как эти ИРС используются в теории реакционной способности?

2. Что такое энергия нуклеофильной, радикальной и электрофильной локализаций?

3. Покажите на примере двухъядерной молекулы, что можно выбрать приближенную модель состояний электронов, из которой следует, что внутренние электроны существенно не влияют на энергию связи в молекуле, а связь эта обусловлена валентными электронами атомов.

4. Показать, что π -МО планарных молекул антисимметричны относительно отражения в плоскости молекул.

5. Показать, что p -АО преобразуется как соответствующие компоненты радиус-вектора при преобразованиях координат.

6. Покажите на примере двухъядерной молекулы, что можно выбрать приближенную модель состояний электронов, из которой следует, что внутренние электроны существенно не влияют на энергию связи в молекуле, а связь эта обусловлена валентными электронами атомов.

7. Каковы основные особенности орбитали Слэтера? Чем слэтеровская орбиталь отличается от водородоподобных орбиталей?

8. Какие экспериментальные возможности существуют для проверки теоремы Купманса?

9. Как в методе Рутана можно достигнуть хартри-фоковского предела? Реально ли это практически? Почему?

10. Запишите общий вид элементов матриц оператора энергии, интегралов перекрывания, энергии в методе Рутана. Каков порядок этих матриц? От чего он зависит? Каковы условия, необходимые для вычисления указанных матриц?

2 Примеры контрольных вопросов и заданий к лабораторным работам

1. Какие основные программы для квантово-химических расчетов Вы знаете? Их применение.

2. Что называют переходным состоянием?

3. Дайте определения следующим понятиям: истинная энергия активации элементарной реакции, путь реакции, энергетический барьер, переходное состояние.

4. Дайте определение молекулярности химической реакции. Приведите примеры сложных и элементарных реакций.

5. Опишите процедуру поиска переходного состояния при помощи различных методов квантовой химии.

3 Примерные темы рефератов

1. Компьютерная графика в химических исследованиях и естественнонаучном образовании.

2. Системы защиты информации в компьютерных системах.
3. Законодательство в сфере информационных технологий.
4. Протоколы передачи данных в компьютерных сетях.
5. Настольные издательские системы.
6. Языки и средства Web-программирования.

4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

1 Список вопросов для подготовки к экзамену

1. Основные направления использования вычислительных технологий в химии.
2. Квантовая химия атома.
3. Квантовая химия молекул.
4. Блок-схема вычислительного процесса.
5. Поверхность потенциальной энергии. Понятие о стационарных точках.
6. Методы учета электронной корреляции (теория возмущения и метод конфигурационного взаимодействия).
7. Квантово-химические основы электронных и колебательных спектров.
8. Иерархия методов квантовой химии. Полуэмпирические методы расчета в квантовой химии. Методы CNDO, INDO, MNDO.
9. Неэмпирические методы расчета. Выбор базисных атомных функций. Номенклатура базисных наборов, их характеристика.
10. Характеристики специализированных программных пакетов для квантово-химических расчетов.
11. Характеристика методов, применяемых при обработке кинетических данных и моделировании кинетики реакции.
12. Стехиометрические расчеты, оценка параметров теоретических или эмпирических закономерностей на основе экспериментально определенных величин.
13. Методы численного интегрирования, используемые для моделирования элементарных реакций.
14. Способы расчета термодинамических параметров химических соединений методами квантовой химии.
15. Преимущества ЭВМ при планировании органического синтеза. Основные операции компьютерного планирования органического синтеза (КПОС).
16. Программы КПОС. Проблемы и возможные перспективы КПОС.
17. Методология компьютерной идентификации веществ с применением информационно-поисковых систем.
18. Расчетные программы для ПЭВМ в вузовском курсе аналитической химии.
19. Основные направления использования ЭВМ в обучении химии (графические возможности, компьютерное моделирование химических процессов и явлений, осуществление химического эксперимента).
20. Преимущества и недостатки компьютера как средства обучения химии. Основные типы программ использования ЭВМ как средства обучения.

2 Примеры билетов к экзамену

ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет»
Кафедра органической химии и технологий
Направление подготовки 04.04.01 - Химия
20__-20__ уч. год

Дисциплина «Компьютерная химия»

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ №1.

1. Методы учета электронной корреляции (теория возмущения и метод конфигурационного взаимодействия).

2. Методология компьютерной идентификации веществ с применением информационно-поисковых систем.

Заведующий кафедрой
органической химии и технологий

ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет»
Кафедра органической химии и технологий
Направление подготовки 04.04.01 - Химия
20__-20__ уч. год
Дисциплина «Компьютерная химия»

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ №2.

1. Иерархия методов квантовой химии. Полуэмпирические методы расчета в квантовой химии. Методы CNDO, INDO, MNDO.

2. Преимущества ЭВМ при планировании органического синтеза. Основные операции компьютерного планирования органического синтеза (КПОС).

Заведующий кафедрой
органической химии и технологий

Критерии экзаменационной оценки	Оценка	Уровень
Студент свободно владеет теоретическим материалом (система знаний о компьютерных методах в химии полностью сформирована), при ответе на экзаменационные вопросы практически не допускает каких-либо неточностей или ошибок.	«отлично»	повышенный (продвинутый) уровень
Студент хорошо владеет теоретическим материалом, имеет сформированную систему знаний о компьютерной химии, однако при ответе на вопросы экзаменатора допускает незначительное число ошибок, не носящих принципиального характера.	«хорошо»	базовый уровень
Студент знает основные компьютерные методы в химии и области их	«удовлетворительно»	пороговый уровень

практического применения, однако плохо разбирается в деталях изучаемого материала. В ответах на вопросы присутствует значительное число ошибок или неточностей.		
Система знаний о компьютерных методах исследования и моделирования в химия не сформирована, отвечая на вопросы экзаменатора студент демонстрирует поверхностные и отрывочные знания курса, либо полное их отсутствие.	«неудовлетворительно»	менее 50%, уровень не сформирован

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

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

5.1 Основная литература:

Для освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья имеются издания в электронном виде в электронно-библиотечных системах «Лань» и «Юрайт».

1 Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.Г. Цирельсон. - Электрон. дан. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>. — Загл. с экрана.

5.2 Дополнительная литература:

1 Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург: Лань, 2017. - 428 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92941>. - Загл. с экрана.

2 Вершинин, В.И. Компьютерная идентификация органических соединений [Текст] / В. И. Вершинин, Б. Г. Дерендяев, К. С. Лебедев; Рос. акад. наук, Сибирское отд-ние, Новосибирский ин-т органической химии им. Н. Н. Ворожцова, М-во образования Рос. Федерации, Омский гос. ун-т. - М.: Академкнига, 2002. - 197 с.

5.3. Периодические издания:

1 Журнал структурной химии - журнал физико-химического профиля, адресованный специалистам, работающим в области квантовой химии, физических методов исследования, кристаллохимии, строения жидкостей, а также широкому кругу химиков. Своеобразие журнала заключается в том, что для исследования электронного и пространственного строения химических соединений в публикуемых работах широко применяются современные физические методы, оригинальные теоретические и экспериментальные подходы. Форма публикаций – статьи и тематические обзоры по различным проблемам структурной химии.

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. Информационный сайт о химии, содержащий базу знаний, справочники и химические онлайн-сервисы (<http://www.xumuk.ru>).

2. Сайт, содержащий статьи соросовского образовательного журнала (<http://www.pereplet.ru/cgi/soros/readdb.cgi>).

3. База данных издательства Springer (<http://link.springer.com>).

4. База данных рефератов и цитирования Scopus (<http://www.scopus.com>).

5. База данных рефератов и цитирования Web of Science (WoS) (<http://apps.webofknowledge.com>).

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Успешное изучение дисциплины «Компьютерная химия» требует от студентов регулярного посещения лекций, а также активной работы на практических занятиях, выполнения тестовых проверочных работ, выполнения и защиты лабораторных работ, ознакомления с основной и дополнительной рекомендуемой литературой.

При подготовке к лекционному занятию студентам рекомендуется:

1) просмотреть записи предыдущей лекции и восстановить в памяти ранее изученный материал;

2) бегло просмотреть материал предстоящей лекции, с целью лучшего усвоения нового материала;

3) самостоятельно проработать отдельные фрагменты темы прошлой лекции, если это необходимо.

При конспектировании лекционного материала студентам нужно стремиться кратко, схематично, последовательно и логично фиксировать основные положения, выводы, обобщения и формулировки, не пытаясь записать весь преподаваемый материал слово в слово.

При подготовке к лабораторному занятию рекомендуется:

1) внимательно изучить материал предстоящей работы и составить план ее выполнения;

2) уделить повышенное внимание экспериментальным особенностям предстоящей работы (используемым реактивам и оборудованию, а также технике работы с ними);

Выполнять лабораторную работу необходимо аккуратно и последовательно, отражая все ее основные этапы в лабораторном журнале. Для успешной защиты лабораторной работы необходимо тщательно изучить лекционный и, если это необходимо, дополнительный теоретический материал по теме работы, а также правильно заполнить лабораторный журнал, сделав все необходимые расчеты и сформулировав выводы по проделанной работе.

При подготовке к практическому занятию (семинару) рекомендуется:

1) ознакомиться с темой и планом занятия, чтобы выяснить круг вопросов, которые будут обсуждаться на занятии;

2) поработать с конспектом лекции по теме занятия, а также ознакомиться с рекомендуемой литературой и (при необходимости) дополнительными источниками информации в виде периодических изданий и Интернет-ресурсов.

При выполнении практической работы студентам необходимо отмечать те вопросы и разделы, которые вызывают у них затруднения. с целью последующей консультации у преподавателя. Каждый студент должен стремиться активно работать на практических занятиях и успешно выполнять тестовые проверочные работы.

Самостоятельная работа наряду с аудиторной представляет одну из важнейших форм учебного процесса. Самостоятельная работа - это планируемая работа студентов, выполняемая по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа предназначена не только для овладения представленной дисциплиной, но и для формирования навыков работы вообще, в учебной, научной, профессиональной деятельности, способности принимать на себя ответственность, самостоятельно решать возникающие проблемы, находить правильные решения и т.д.

№	Вид СРС	Организация деятельности студента Форма контроля
1	2	3
1.	Оформление лабораторных работ	Проведение необходимых расчетов, аккуратное оформление хода и результатов выполненной работы в лабораторном журнале. Форма контроля – защита лабораторных работ.
2.	Изучение теоретического материала	Работа с конспектом лекций, а также с рекомендуемой основной и дополнительной литературой по заданной теме, ознакомление с периодическими изданиями и ресурсами сети Интернет. Форма контроля – выполнение тестовых работ.
3.	Реферат	Работа с учебной и научно-технической литературой, поиск информации в периодических изданиях и ресурсах сети Интернет, самостоятельный выбор и обработка необходимого материала, а также написание реферативной работы, ее оформление в виде презентации и представление в форме устного доклада. Форма контроля – защита реферата.
4.	Подготовка к текущему контролю	Изучение теоретического материала, необходимого для успешной защиты лабораторных работ, выполнения тестовых работ и других видов текущего контроля. Форма контроля – все виды текущего контроля.

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала.

Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю)

8.1 Перечень информационных технологий

1. Использование электронных презентаций при проведении лекционных занятий.
2. Проверка самостоятельно решенных задач и консультирование посредством электронной почты.

8.2 Перечень необходимого программного обеспечения

1. Операционная система Microsoft Windows.
2. Программный пакет для работы с различными типами документов Microsoft Office Professional Plus.

8.3 Перечень информационных справочных систем:

1. Научная электронная библиотека (<http://www.elibrary.ru>).
2. Электронная библиотечная система издательства «Лань» (<http://e.lanbook.com>).
3. Электронная библиотечная система «Юрайт» (<http://www.biblio-online.ru>).
4. Научная электронная библиотека «КиберЛенинка» (<http://cyberleninka.ru>).
5. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека ONLINE» (www.biblioclub.ru).

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Для проведения занятий по дисциплине «Компьютерная химия», предусмотренной учебным планом подготовки магистров, имеется необходимая материально-техническая база, соответствующая действующим санитарным и противопожарным правилам и нормам:

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа – ауд. 425с, ул. Ставропольская, 149 (комплект учебной мебели, меловая доска, переносное мультимедийное оборудование).
2.	Семинарские занятия	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа – ауд. 425с, ул. Ставропольская, 149 (комплект учебной мебели, меловая доска, переносное мультимедийное оборудование).
3.	Лабораторные занятия	Учебная аудитория для проведения занятий лабораторного типа – ауд. 414с, ул. Ставропольская, 149 (учебная лаборатория, укомплектованная специализированной мебелью, вытяжной системой вентиляции, меловой доской, средствами пожарной безопасности и оказания первой медицинской помощи, лабораторным оборудованием: весы лабораторные электронные A&DEK-410i, электроплитки, сушильный

		шкаф, мешалки механические, мешалки магнитные ИКА HS 7, ротационные испарители, наборы химической посуды и реактивов.).
4.	Курсовое проектирование	Курсовая работа не предусмотрена учебным планом.
5.	Групповые (индивидуальные) консультации	Аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации – ауд. 425с, ул. Ставропольская, 149 (комплект учебной мебели, меловая доска, переносное мультимедийное оборудование).
6.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации – ауд. 425с, ул. Ставропольская, 149 (комплект учебной мебели, меловая доска, переносное мультимедийное оборудование).
7.	Самостоятельная работа	Помещение для самостоятельной работы – ауд. 401с, ул. Ставропольская, 149 (компьютерная техника с подключением к сети «Интернет», программой экранного увеличения и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета).