МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ 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
_____ Хагуров Т.А.

«27» ____мая_____ 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.О.09 «КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ»

Направление подготовки – 04. 04.01 Химия

Направленность (профиль) – «Перспективные соединения и материалы на их основе»

Форма обучения – очная

Квалификация выпускника – магистр

Краснодар 2022

Рабочая программа дисциплины Б1.О.09 «Компьютерная химия» составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.04.01 – Химия.

Программу составил:

Волынкин В.А., зав. кафедрой общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии, к.х.н. _____

Рабочая программа дисциплины Б1.О.09 «Компьютерная химия» утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии протокол № 9 от «21» апреля 2022 г.

Заведующий кафедрой _____ Волынкин В.А.

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий, протокол № 7 «25» апреля 2022 г.

Председатель УМК факультета Беспалов А.В. _____

Рецензенты:

Крапивин Г.Д, профессор кафедры биоорганической химии
ФГБОУ ВО «КубГТУ», д.х.н., профессор

Болотин С.Н, доцент кафедры экологии и природопользования
ФГБОУ ВО «КубГУ», к.х.н, доцент

1. Цели и задачи освоения дисциплины

1.1 Цель освоения дисциплины

- познакомить студентов с возможностями математического моделирования в химии, его применения для решения химических задач и привить им навыки работы с соответствующим программным обеспечением.

1.2. Задачи дисциплины

- научить студентов применению методов математического моделирования для решения химических задач, компьютерного моделирования структур молекул и химических процессов
- научить грамотно применять полученные знания при решении ряда задач, возникающих при исследованиях строения молекул. Например: классификация электронных термов атомов и молекул; определение симметрии нормальных колебаний молекулы и их активности в ИК и КР спектрах; определение симметрии возможной геометрической конфигурации молекулы и т.д.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Компьютерная химия» относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» (Б1.О.09).

В соответствии с рабочим учебным планом дисциплина изучается на 1 курсе по очной форме обучения. Вид промежуточной аттестации: зачет во 2 семестре.

Для ее изучения необходимо предварительное изучение курсов бакалавриата «Не-органическая химия», «Кристаллография» и «Строение вещества».

Знания и навыки, полученные в результате освоения данного курса, могут быть ис-пользованы при решении различных задач общеобразовательных и специальных химиче-ских дисциплин, изучении дисциплин Электронная и колебательная спектроскопия, Тео-ретические закономерности и стратегия синтеза новых материалов, в научно-исследовательской работе студентов.

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 компетенций:

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
ОПК-3 - Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.	
ИОПК-3.1. Использует современные IT технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.	Знать теоретические основы современных информационных технологий, в том числе принципы организации систем и баз данных в профессиональной области
	Уметь анализировать, оптимизировать и применять современные информационные технологии при решении научных задач
	Владеть современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении информации при проведении самостоятельных научных исследований
ИОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.	Знать теоретические основы работы используемых программных продуктов
	Уметь правильно применять необходимые методы расчетов в соответствии с поставленной задачей.
	Владеть программным обеспечением для расчетов атомных и молекулярных систем.
ИОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ и материалов, а также процессов с их участием.	Знать основные приемы анализа и планирования научного исследования, а также основные понятия квантовой химии, используемые при изучении атомных и молекулярных систем
	Уметь абстрактно мыслить, использовать методы анализа и синтеза в научной работе, соотносить теоретические положения с экспериментальными данными, применять полученные знания при решении задач исследования строения молекул.
	Владеть способностью анализировать разнородные экспериментальные факты, обобщать значительное число данных, осмыслять теоретические положения для решения задач в сфере профессиональной деятельности

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 (часы)			
			2			
Контактная работа, в том числе:						
Аудиторные занятия (всего):		**48**	**48**			
Занятия лекционного типа		16	16	-	-	-
Лабораторные занятия		32	32	-	-	-
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		-	-	-	-	-
Иная контактная работа:						
Контроль самостоятельной работы (КСР)		-	-			
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,2	0,2			
Самостоятельная работа, в том числе:						
Курсовая работа		-	-	-	-	-
Проработка учебного (теоретического) материала		40	40	-	-	-
Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)		30	30	-	-	-
Реферат		10	10	-	-	-
Контроль:						
Подготовка к экзамену						
Общая трудоемкость	**час.**	**144**	**144**	**-**	**-**	**-**
	в том числе контактная работа	**48,2**	**48,2**			
	зач. ед	**4**	**4**			

2.2 Структура дисциплины.

Распределение видов учебной работы и их трудоёмкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые во **2** семестре (для студентов ОФО)

№	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	СРС
1.	Строение атома, одноэлектронный атом, многоэлектронные атомы		4		4	15,8
2.	Теория химической связи		4		8	20
3.	Введение в квантово-химические методы вычислений		4		8	20
4.	Электронная корреляция		2		4	20
5.	Теория функционала плотности		2		8	20
	ИТОГО по разделам дисциплины		16		32	95,8
	Контроль самостоятельной работы (КСР)		-	-	-	-
	Промежуточная аттестация (ИКР)	0.2	-	-	-	-
	Подготовка к текущему контролю		-	-	-	-
	Общая трудоемкость по дисциплине	144	-	-	-	-

Примечание: Л – лекции, ПЗ – практические занятия / семинары, ЛР – лабораторные занятия, СРС – самостоятельная работа студента

2.3 Содержание разделов дисциплины

2.3.1 Занятия лекционного типа

№ раздела	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1	Введение в квантово-химические методы вычислений.	Основные принципы квантовой механики. Атомные орбитали. Квантовые числа. Многоэлектронные атомы. Свойства многоэлектронных атомов.	*Коллоквиум*
2	Теория химической связи.	Метод МО ЛКАО. Базисные наборы атомных орбиталей.	*Рефераты, доклады*
3	Введение в квантово-химические методы вычислений	Полуэмпирические методы. Симметрия молекулярных систем. Программное обеспечение расчетов.	*Коллоквиум с докладами в виде презентации*
4	Электронная корреляция.	Электронная корреляция. Методы учета электронной корреляции.	
5	Теория функционала плотности.	Теория функционала плотности.	

2.3.2 Занятия семинарского типа

(учебным планом занятия семинарского типа не предусмотрены)

2.3.3 Лабораторные занятия

№	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	3	4
1.	***Hyper Chem***. Оптимизация геометрии, определение активных центров молекулы. Определение потенциала ионизации.	*Отчет по лаб. работе*
2.	***Hyper Chem***. Внутреннее вращение. Расчет конформаций.	*Отчет по лаб. работе*
3.	***Hyper Chem***. Расчет дипольного момента, энтальпии образования, сродства к электрону.	*Решение задач*
4.	***GAMESS***. Составление входного файла. Задание параметров расчета.	*Отчет по лаб. работе*
5.	***GAMESS***. Расчет энергии, оптимизация геометрии, получение информации об углах и длинах связей.	*Отчет по лаб. работе*
6.	***GAMESS***. Получение спектральной информации (ИК, ЯМР и т.д.).	*Отчет по лаб. работе*
7.	Программа ***MOPAC***. Основы работы.	*Коллоквиум с докладами в виде презентации.*
8.	Самостоятельная работа №1	*КР*

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ

Курсовые работы – не предусмотрены

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	Теоретическая самоподготовка	Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. 89 с. Интернет ресурсы по дисциплине, в том числе указанные в п.6.
2	Подготовка к ЛР	
3	Реферат	
4	Доклады, презентации	

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.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3. Образовательные технологии

В ходе изучения дисциплины предусмотрено использование следующих образовательных технологий: лекции, практические занятия, проблемное обучение, самостоятельная работа студентов.

Для формирования профессиональных компетенций в процессе освоения курса используется технология профессионально-развивающего обучения, предусматривающая не только передачу теоретического материала, но и стимулирование и развитие продуктивных познавательных действий студентов (на основе психолого-педагогической теории поэтапного формирования умственных действий). Компетентностный подход в рамках преподавания дисциплины реализуется в использовании интерактивных технологий и активных методов (проектных методик, разбора конкретных ситуаций) в сочетании с внеаудиторной работой. В процессе самостоятельной деятельности студенты осваивают и анализируют передовой опыт, используя имеющуюся литературу и информационные технологии, выступают с презентациями, накапливают портфолио разработок.

Информационные технологии, применяемые при изучении дисциплины: использование информационных ресурсов, доступных в информационно-телекоммуникационной сети Интернет.

Адаптивные образовательные технологии, применяемые при изучении дисциплины – для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Оценочные средства предназначены для контроля и оценки образовательных достижений обучающихся, освоивших программу учебной дисциплины «Компьютерная химия».

Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Оценочные средства включают контрольные материалы для проведения текущего контроля в форме тестовых заданий, доклада-презентации по проблемным вопросам, разно-

уровневых заданий, ситуационных задач и промежуточной аттестации в форме вопросов и заданий зачету.

Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Примерные темы рефератов, докладов, эссе

1. Классификация термов атомов. Теория кристаллического поля. Расщепление атомных уровней в кристаллическом поле. Анализ расщепления *d*- и *f*-уровней в полях различной симметрии. Цис- и транс-влияние в комплексах переходных металлов.
2. Электронные состояния молекул. Классификация электронных состояний нелинейных молекул. Определение симметрии электронной волновой функции линейных молекул. Электронные состояния нелинейных молекул, вырожденные для высокосимметричных конфигураций ядер. Эффект Реннера-Теллера. Эффект Яна-Теллера.
3. Колебания молекул. Метод локальной симметрии. Определение колебательного представления произвольной многоатомной молекулы. Представления оператора дипольного момента и правила отбора. Правила отбора в ИК- и КР-спектрах. Построение симметризованных координат.
4. Влияние симметрии на протекание химических реакций. Определение симметрии возможного переходного состояния. Определение путей возможных внутримолекулярных перегруппировок. Модель Бейдера-Пирсона.
5. Кристаллы и квазикристаллы. Основные типы химической связи в кристаллах. Гомодесмические и гетеродесмические структуры. Критерий устойчивости структур. Кристаллические структуры координационных соединений. Общая характеристика молекулярных кристаллов. Особенности органических кристаллов.

Примеры вариантов контрольных работ, тестов

ВАРИАНТ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ № 1

Для указанных молекул (H_2O, NO_2, CO_2, H_2O_2, NH_3, HPO_3) нарисовать структуру, произвести оптимизацию геометрии с использованием всех доступных для данного типа методов (молекулярной механики, полуэмпирических, *ab initio*). Создать таблицу данных по энергии, длин связей и уг-

лов для каждого метода. Полученные данные сравнить между собой и справочными данными. Сделать вывод об эффективности и адекватности различных методов.

Зачетно-экзаменационные материалы для промежуточной аттестации.

Вопросы для подготовки к зачету

1. Атомная орбиталь (АО) многоэлектронного атома. Точные и приближенные аналитические функции АО. Атомные орбиталь Слейтера – Зенера, двухэкспоненциальные (DZ) и гауссовские АО. Формирование базисов АО для неэмпирических расчетов и полуэмпирических расчетов.
2. Молекулярные системы. Использование приближения ССП Хартри – Фока в методе МО ЛКАО. Одноэлектронное уравнение Рутаана для закрытых оболочек. Одно- и многоцентровые интегралы межэлектронного взаимодействия.
3. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета. Выбор БАО для неэмпирических и полуэмпирических расчетов. Возможность расчета спектральных характеристик молекул. Влияние на результаты размера БАО.
4. Использование уравнений классической механики для описания молекулярных систем. Методы молекулярной механики (ММ). Описание основных типов взаимодействия в молекулярной системе. Понятие силового поля. Виды и назначения силовых полей ММ2, AMBER, BIO для различных молекулярных систем. Сравнение метода ММ с другими расчетными методами.
5. Методы функционала плотности DFT. Связь полной энергия с функционалом матриц электронной плотности. Теорема Хоэнберга –Кона. Обменная и корреляцион-ная части полной энергии. Параметризация метода.
6. Квантово- химический расчет электронных и молекулярных спектров молекул. Основные подходы и теоретическое обоснования для расчета спектров УФ, ИК и ЯМР.
7. Многоэлектронные атомы. Спин-орбиталь одноэлектронной волновой функции и атома. Определитель Слейтера. Способ задания спин-орбитали атома в методах Хартри и Хартри – Фока. Сравнение двух моделей. Открытые и закрытые оболочки.
8. Многоэлектронные атомы. Межэлектронное отталкивание и способы его учета при решении уравнения Шредингера. Метод самосогласованного поля (ССП) Хартри-Фока. Одноэлектронные уравнения Хартри -Фока. Одно- и двухэлектронные интегралы.

9. Одноэлектронное уравнение Рутаана. Неэмпирические методы расчета молекул. Приближенные формы атомной орбитали. Выбор базиса атомных орбиталей (БАО). Использование примитивных (STO – NG) и сжатых валентно – расщепленных (STO M-NPG) БАО гауссовского типа. Включение в БАО поляризационных и диффузных АО.
10. Молекулярные системы. Применение теории симметрии для построения молекулярных волновых функций. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Связь молекулярной симметрии с типами неприводимых представлений на примере молекулы NH3.
11. Молекулярные системы. Использование приближения ССП Хартри – Фока в методе МО ЛКАО. Одноэлектронное уравнение Рутаана для закрытых оболочек. Одно- и многоцентровые интегралы межэлектронного взаимодействия.
12. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета. Выбор БАО для неэмпирических и полуэмпирических расчетов. Хартри-Фоковский предел точности неэмпирических расчетов.
13. Возможность расчета спектральных характеристик молекул. Возможность расчета структурных, физических и термодинамических характеристик молекул. Влияние на результаты размера БАО.
14. Неэмпирические методы расчета. Достоинства и недостатки. Электронная корреляция и ее вклад в полную энергию системы. Методы учета электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия (CI). Метод теории возмущений Меллера-Плессета (MP). Возмущения второго и четвертого порядка.
15. Уравнение ССП МО ЛКАО Рутаана. Полуэмпирические методы его расчета. Учет интегралов перекрывания. Основные положения метода INDO. Различные виды параметризации метода INDO . Необходимые исходные данные для расчета одно и двухэлектронных интегралов. Достоинства и недостатки метода.
16. Уравнение ССП МО ЛКАО Рутаана. Полуэмпирические методы его расчета. Основные положения метода CNDO. Различные виды параметризации метода CNDO. Возможность расчета возбужденных состояний (CNDO/S). Необходимые исходные данные для расчета одно и двухэлектронных интегралов.
17. Уравнение ССП МО ЛКАО Рутаана. Полуэмпирические методы его расчета. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием. Основные положения методов MNDO и AM1. Достоинства и недостатки.
18. Методы расчета молекул. Одноэлектронные уравнения Рутаана. Одно- и многоцентровые кулоновские и обменные интегралы и их вклады в полную энергию. Способы сокращения их числа в полуэм-

пирических методах

19. Полуэмпирические методы расчета. Нулевое дифференциальное перекрывание. Нарушение инвариантности уравнения Рутаана к операциям симметрии. Метод CNDO.
20. Использование уравнений классической механики для описания молекулярных систем. Методы молекулярной механики (ММ). Описание основных типов взаимодействия в молекулярной системе. Понятие силового поля. Виды и назначения силовых полей ММ2, AMBER, BIO для различных молекулярных систем. Сравнение метода ММ с другими расчетными методами.
21. Методы функционала плотности DFT. Связь полной энергия с функционалом матриц электронной плотности. Теорема Хоэнберга –Кона. Обменная и корреляцион-ная части полной энергии. Параметризация метода.
22. Квантово- химическое определение частот колебаний сложной молекулы. Нормальные колебания. Симметрия нормальных колебаний. Расчет количества колебаний с помощью теории групп на примере молекулы H2S или любой другой..
23. Квантово- химический расчет электронных и молекулярных спектров молекул. Основные подходы и теоретическое обоснования для расчета спектров УФ, ИК и ЯМР.
24. Квантово- химический расчет теплот химической реакции в неэмпирических и полуэмпирических методах.

Критерии оценивания результатов обучения

«зачтено»: студент владеет теоретическими знаниями по данному разделу, знает и понимает изученные концепции и теории, допускает незначительные ошибки; студент умеет правильно объяснять материал, иллюстрируя его примерами, умеет аргументировать собственную точку зрения.

«не зачтено»: материал не усвоен или усвоен частично, студент затрудняется привести примеры по данному разделу, довольно ограниченный объем знаний программного материала.

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 предусматрива-

ется 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.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации 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.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

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

5.1 Учебная литература

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.Г. Цирельсон. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94104
2. В. Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для студентов вузов М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с.
3. Холанд А. Молекулы и модели : молекулярная структура соединений элементов главных групп / пер. с англ. Г. В. Гиричева, Н. И. Гиричевой . - М. : URSS : [КРАСАНД], 2011. - 382 с.
4. Минкин, Владимир Исаакович, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. Теория строения молекул : учебное пособие для студентов вузов / - 2-е изд., перераб. и доп. - Ростов н/Д : Феникс, 1997. - 558 с.
5. Грибов Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул. – Интеллект, 2010, 312 с.

5.2. Периодическая литература

1. Базы данных компании «Ист Вью» http://dlib.eastview.com
2. Журнал структурной химии
3. Координационная химия

5.3. Интернет-ресурсы, в том числе современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Электронно-библиотечные системы (ЭБС):

1. ЭБС «УНИВЕРСИТЕТСКАЯ БИБЛИОТЕКА ОНЛАЙН» www.biblioclub.ru
2. ЭБС «ZNANIUM.COM» www.znanium.com
3. ЭБС «ЛАНЬ» https://e.lanbook.com

Профессиональные базы данных:

1. Scopus http://www.scopus.com/
2. ScienceDirect www.sciencedirect.com
3. Научная электронная библиотека (НЭБ) http://www.elibrary.ru/
4. Springer Journals https://link.springer.com/
5. zbMath https://zbmath.org/
6. "Лекториум ТВ" http://www.lektorium.tv/

Ресурсы свободного доступа:

1. http://www.gaussian.com
2. http://www.qchem.ru/
3. http://www.msg.ameslab.gov/gamess/
4. http://quant.distant.ru

Собственные электронные образовательные и информационные ресурсы КубГУ:

1. Среда модульного динамического обучения http://moodle.kubsu.ru
2. База учебных планов, учебно-методических комплексов, публикаций и конференций http://mschool.kubsu.ru/
3. Библиотека информационных ресурсов кафедры информационных образовательных технологий http://mschool.kubsu.ru;
4. Электронный архив документов КубГУ http://docspace.kubsu.ru/
5. Электронные образовательные ресурсы кафедры информационных систем и технологий в образовании КубГУ и научно-методического журнала "ШКОЛЬНЫЕ ГОДЫ" http://icdau.kubsu.ru/

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

Методические указания и рекомендации к созданию презентации по теме магистерской работы для устных и стендовых научных докладов.

При создании мультимедийной презентации следует руководствоваться следующими принципами:

- Прежде чем приступить к работе над презентацией, следует добиться полного понимания того, о чем вы собираетесь рассказывать.
- Презентация должна быть краткой, доступной и композиционно целостной.
- В презентации не должно быть ничего лишнего. Каждый слайд должен представлять собой необходимое звено повествования и работать на общую идею презентации.
- Продолжительность презентации со сценарием должна составлять не более 20-30 минут. Для демонстрации нужно подготовить примерно 20-25 слайдов (показ одного слайда занимает около 1 минуты, плюс время для ответов на вопросы слушателей).
- Не перегружайте слайды лишними деталями. Иногда лучше вместо одного сложного слайда представить несколько простых. Не следует пытаться "затолкать" в один слайд слишком много информации.
- Спецэффекты должны быть сведены к минимуму и использовать только с целью привлечь внимание зрителя к ключевым моментам демонстрации.
- Необходимо поддерживать единый стиль представления информации.
- Шрифты рекомендуется использовать стандартные - Times, Arial. Лучше всего ограничиться использованием двух или трех шрифтов для всей презентации.
- Вся презентация выполняется в одной цветовой палитре, обычно на базе одного шаблона.
- Информация должна быть по возможности представлена в виде графиков, схем, таблиц или списков.

Методические рекомендации преподавателям по методике проведения основных видов учебных занятий

Лекции

Методика чтения лекций

Лекции являются одним из основных методов обучения по дисциплине, которые должны решать следующие задачи:

- изложить важнейший материал программы курса, освещающий основные моменты;
- развить у студентов потребность к самостоятельной работе над

учебной и научной литературой.

Главной задачей каждой лекции является раскрытие сущности темы и анализ ее главных положений. Рекомендуется на первой лекции довести до внимания студентов структуру курса и его разделы, а в дальнейшем указывать начало каждого раздела, суть и его задачи, а, закончив изложение, подводить итог по этому разделу, чтобы связать его со следующим.

Содержание лекций

Содержание лекций определяется рабочей программой курса. Крайне желательно, чтобы каждая лекция охватывала и исчерпывала определенную тему курса и представляла собой логически вполне законченную работу. Лучше сократить тему, но не допускать перерыва ее в таком месте, когда основная идея еще полностью не раскрыта.

Лабораторные занятия

Методика проведения лабораторных занятий

Целями проведения лабораторных работ являются:

- установление связей теории с практикой в форме экспериментального подтверждения положений теории;
- обучение студентов умению анализировать полученные результаты;
- контроль самостоятельной работы студентов по освоению курса;
- обучение навыкам профессиональной деятельности

Цели лабораторного практикума достигаются наилучшим образом в том случае, если выполнению эксперимента предшествует определенная подготовительная внеаудиторная работа. Поэтому преподаватель обязан довести до всех студентов график выполнения лабораторных работ с тем, чтобы они могли заниматься целенаправленной домашней подготовкой.

Перед началом очередного занятия преподаватель должен удостовериться в готовности студентов к выполнению лабораторной работы путем короткого собеседования и проверки наличия у студентов заготовленных протоколов проведения работы.

Указания по самостоятельной работе.

Самостоятельная работа составляет не менее 50% от времени, отводимого на изучение дисциплины. При самостоятельной работе студент должен ознакомиться с основными учебниками и учебными пособиями, дополнительной литературой и иными доступными литературными источниками. При работе с литературой по конкретным темам курса, в том числе указанным для самостоятельной проработки, основное внимание следует уделять важнейшим понятиям, терминам, определениям, для скорейше-

го усвоения которых целесообразно вести краткий конспект.

7. Материально-техническое обеспечение по дисциплине (модулю)

Наименование специальных помещений	Оснащенность специальных помещений	Перечень лицензионного программного обеспечения
Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: интерактивная доска SMART Board, короткофокусный интерактивный проектор, ноутбук, меловая доска (ауд. 422С).	Microsoft Windows, Microsoft PowerPoint
Учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: интерактивная доска SMART Board, короткофокусный интерактивный проектор, ноутбук, меловая доска (ауд. 422С).	Microsoft Windows, Microsoft PowerPoint
Учебные аудитории для проведения лабораторных работ. Компьютерные классы.	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: терминальные станции с операционной системой Windows и необходимым программным обеспечением (ауд. 103).	Microsoft Windows, Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint), ACD Labs Chemsketch freeware, GAMESS, HyperChem 8.0, MOPAC
Учебные аудитории для курсового проектирования (выполнения курсовых работ)	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и дос-	Microsoft Windows, Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint), ACD Labs Chemsketch freeware, GAMESS, HyperChem 8.0, MOPAC

	тупом в электронную информационно-образовательную среду университета (проводное соединение и беспроводное соединение по технологии Wi-Fi). (ауд. 428с, 431с)	