

Аннотация к рабочей программе дисциплины
Б1.О.08 «Компьютерная химия»

Объем трудоемкости: 4 зачетных единицы.

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

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.

Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Компьютерная химия» относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» (Б1.О.08).

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 «Неорганическая химия», «Кристаллография» и «Строение вещества».

Знания и навыки, полученные в результате освоения данного курса, могут быть использованы при решении различных задач общеобразовательных и специальных химических дисциплин, изучении дисциплин Электронная и колебательная спектроскопия, Теоретические закономерности и стратегия синтеза новых материалов, в научно-исследовательской работе студентов.

Требования к уровню освоения дисциплины

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 ИТ 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

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
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 разнообразные экспериментальные факты, обобщать значительное число данных, осмысливать теоретические положения для решения задач в сфере профессиональной деятельности

Содержание дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

№	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
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	-	-	-	-

Курсовые работы: не предусмотрены.

Форма проведения аттестации по дисциплине: зачет.

Автор: канд. хим. наук, доц. Волынкин В.А.