

АННОТАЦИЯ

дисциплины Б1.В.ДВ.01.02 КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУР МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Объем трудоемкости: 5 зачетных единиц (180 часов, из них – 72,2 часа контактной работы: лекционных 36 часов, практических 36 часов, ИКР - 0,2 часа; 107,8 часа самостоятельной работы)

Цель дисциплины

Целью освоения дисциплины «Компьютерное моделирование структур молекул и химических процессов» является изучение основных направлений применения расчетных 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.

Задачи дисциплины

Задачи учебной дисциплины «Компьютерное моделирование структур молекул и химических процессов» состоят в ознакомлении студентов с основными возможностями компьютерного моделирования в химии, программами для квантово-химических расчетов, а также с химическими базами данных.

Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Компьютерное моделирование структур молекул и химических процессов» относится к вариативной части и является дисциплиной по выбору студента.

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-1	Способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	основные направления применения компьютерных технологий в химических исследованиях и промышленно й химии		
2.	ОПК-2	Владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и		использовать прикладные программные продукты и информационн ые ресурсы при решении	навыками применения компьютерных технологий в научных исследованиях, образовании,

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
		обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации		экспериментальных и теоретических проблем в области химии	производственных секторов 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

Основные разделы дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.
Разделы дисциплины, изучаемые в 9 семестре.

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1.	Предмет компьютерной химии	25,8	4		4	17,8
2.	Химические редакторы и базы данных	30	6		8	16
3.	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	44	6		12	26
4.	Обработка экспериментальных данных	28	8		4	16
5.	Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры	26	6		4	16
6.	Компьютерные технологии в обмене научной информацией	26	6		4	16
Итого по дисциплине:			36		36	107,8

Курсовая работа: не предусмотрена учебным планом.

Форма проведения аттестации по дисциплине: зачет

Основная литература:

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.

Автор РПД  Беспалов А.В.
Ф.И.О.