

АННОТАЦИЯ

дисциплины Б1.В.ДВ.04.02 КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ

Объем трудоемкости: 4 зачетных единицы (144 часа, из них – 84,3 часа контактной работы: лекционных 28 часов, практических 56 часов, ИКР - 0,3 часа; 33 часа самостоятельной работы; контроль – 26,7 часа)

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.

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.

Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Компьютерная химия» 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-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 компьютерными технологиями при планировании химических исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов
2.	ПК-2	Владением теорией и навыками практической		использовать прикладные	навыками применения компьютерных

№ п.п.	Индекс компет енции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
		работы в избранной области химии		программные 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

Основные разделы дисциплины

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в семестре В.

№ разд ела	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

Курсовая работа: не предусмотрена учебным планом

Форма проведения аттестации по дисциплине: экзамен

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.