

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

Хагуров Т.А.

*подпись*

« 27 » 04 2018 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

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

Направление подготовки - 04. 04.01 Химия

Направленность (профиль) - Неорганическая химия

Программа подготовки - академическая

Форма обучения - очная

Квалификация (степень) выпускника - магистр

Краснодар 2018

**Рабочая программа дисциплины КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУР МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ** составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 – Химия (профиль Неорганическая химия) №1042 от 23 сентября 2015 г. (Зарегистрирован в Минюсте 19 октября 2015 г. № 39357)

**Программу составил**

Волынкин В.А., доцент кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии, к.х.н. 

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии (разработчика) протокол № 8 «10» апреля 2018 г.

Заведующий кафедрой  
д.х.н., профессор

 Буков Н.Н.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии (выпускающей) протокол № 8 «10» апреля 2018 г.

Заведующий кафедрой  
д.х.н., профессор

 Буков Н.Н.

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий, протокол № 5 «20» апреля 2018 г.

Председатель УМК факультета Стороженко Т.П.



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

**Рабочая программа учебной дисциплины  
«Компьютерное моделирование структур молекул и  
химических процессов»**

**для студентов факультета химии и высоких технологий  
направление подготовки 04.04.01 – Химия  
(профиль Неорганическая химия)**

**1. Цели и задачи освоения дисциплины**

**1.1 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.

**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**

Курс «Компьютерное моделирование структур молекул и химических процессов» относится к вариативной части Блока Б1 «Дисциплины (модули)» (Б1.В.ДВ.01.02). Для его изучения необходимо предварительное изучение курсов бакалавриата Б1.Б.12 Неорганическая химия, Б1.Б.09 «Кристаллография» и Б1.В.03 «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 Компьютерное моделирование структур молекул и химических процессов, Молекулярная спектроскопия координационных соединений, 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 общекультурных и профессиональных компетенций: ОК-1, ОПК-1, ПК-1.

№ п. п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1	ОК-1	способностью к абстрактно-мысленной, анализу, синтезу	основные приемы анализа и синтеза, основные категории формальной логики	абстрактно мыслить, использовать методы анализа и синтеза в научной работе, соотносить теоретические положения с экспериментальными данными	способностью анализировать разнородные экспериментальные факты, обобщать значительное число данных, осмысливать теоретические положения
2	ОПК-1	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Основные понятия квантовой химии, используемые при изучении атомных и молекулярных систем	грамотно применять полученные знания при решении ряда задач, возникающих при исследованиях строения молекул.	Методологией квантовой химии и ее приложений к изучению атомных и молекулярных систем
3	ПК-1	способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно	Основные принципы планирования научного исследования.	самостоятельно составлять план исследования и получить новые научные и прикладные результаты	приемами осмысления базовой и фактуальной информации для решения научно-исследова-

		составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты			тельных и производственных задач в сфере профессиональной деятельности
--	--	---	--	--	--

## 2. Структура и содержание дисциплины

### 2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 5 зач. ед. (180 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры (часы)			
		5			
<b>Контактная работа, в том числе:</b>					
<b>Аудиторные занятия (всего):</b>	<b>72</b>	<b>72</b>			
Занятия лекционного типа	36	36	-	-	-
Лабораторные занятия	36	36	-	-	-
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)	-	-	-	-	-
	-	-	-	-	-
<b>Иная контактная работа:</b>					
Контроль самостоятельной работы (КСР)	-	-			
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,5	0,5			
<b>Самостоятельная работа, в том числе:</b>					
<i>Курсовая работа</i>	-	-	-	-	-
<i>Проработка учебного (теоретического) материала</i>	56	56	-	-	-
<i>Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)</i>	20	20	-	-	-
<i>Реферат</i>	4,8	4,8	-	-	-
Подготовка к текущему контролю			-	-	-
<b>Контроль:</b>					
Подготовка к экзамену	26,7	26,7			
<b>Общая трудоёмкость</b>	<b>час.</b>	<b>180</b>	<b>180</b>	<b>-</b>	<b>-</b>
	<b>в том числе контактная работа</b>	<b>72,5</b>	<b>72,5</b>		
	<b>зач. ед</b>	<b>5</b>	<b>5</b>		

## 2.2 Структура дисциплины.

Распределение видов учебной работы и их трудоёмкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в 9 семестре (для студентов ОФО)

№	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеауди- торная работа
			Л	ПЗ	ЛР	СРС
1	2	3	4	5	6	7
1.	Строение атома. Одноэлектронный атом. Много-электронные атомы.	22	4		2	16
2.	Теория химической связи.	48	12		12	24
3.	Электронная корреляция. Теория функционала плотности.	46	10		12	24
4.	Методы расчетов.	36,8	10		10	16,8
	<b>Итого по дисциплине:</b>	<b>152,8</b>	<b>36</b>		<b>36</b>	<b>80,8</b>

## 2.3 Содержание разделов дисциплины

### 2.3.1 Занятия лекционного типа

№ раз-дела	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контро-ля
1	2	3	4
1	Введение в кван-тово-химические методы вычис-лений.	Основные принципы квантовой механики. Атомные орбитали. Квантовые числа. Много-электронные атомы. Свойства многоэлек-тронных атомов.	<i>Коллоквиум</i>
2	Теория химиче-ской связи.	Метод МО ЛКАО. Базисные наборы атомных орбиталей. Электронная корреляция. Методы учета электронной корреляции.	<i>Рефераты, доклады</i>
3	Расчетные мето-ды.	Полуэмпирические методы. Теория функцио-нала плотности. Симметрия молекулярных систем. Программное обеспечение расчетов.	<i>Коллоквиум с докладами в виде пре-зентации</i>

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

### 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.б.
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**

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).

Активизации и интенсификации познавательного процесса способствуют моделирование проблемных ситуаций, мультимедийные презентации в лекционном курсе. В рамках лабораторных занятий применяются методы проектного обучения, исследовательские методы, тренинговые формы, метод конкретных ситуаций. В процессе самостоятельной деятельности студенты осваивают и анализируют передовой опыт, используя имеющуюся литературу и информационные технологии, посещают предприятия, выступают с презентациями, накапливают портфолио разработок.

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

### **4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации**

Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде тестов и контрольных работ. Итоговый контроль осуществляется приемом зачета и экзамена.

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

– 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.

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. Фонд оценочных средств оформляется как отдельное приложение к рабочей программе.

## **4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации**

### **4.1.1 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 кри-

сталлов. Особенности органических кристаллов.

#### 4.1.2 Примеры вариантов контрольных работ, тестов

Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде тестов и контрольных работ. Итоговый контроль осуществляется приемом экзамена.

#### ВАРИАНТ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ № 1

Для указанных молекул ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{HPO}_3$ ) 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 углов для каждого метода. Полученные данные сравнить между собой и справочными данными. Сделать вывод об эффективности и адекватности различных методов.

#### 4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

##### 4.2.1 Вопросы для подготовки к зачету

1. Атомная орбиталь (АО) многоэлектронного атома. Точные и приближенные аналитические функции АО. Атомные орбитали 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 MM2, AMBER, BIO для различных молекулярных систем. Сравнение метода ММ с другими расчетными методами.
5. Методы функционала плотности DFT. Связь полной энергии с функционалом матриц электронной плотности. Теорема Хоэнберга –Кона. Обменная и корреляционная части полной энергии. Параметризация метода.
6. Квантово- химический расчет электронных и молекулярных спектров молекул. Основные подходы и теоретические обоснования для расчета спектров УФ, ИК и ЯМР.

## 4.2.2 Вопросы для подготовки к экзамену

7. 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.
8. 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.
9. 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.
10. 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.
11. 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 NH<sub>3</sub>.
12. Молекулярные системы. Использование приближения СПП Хартри – Фока в методе МО ЛКАО. Одноэлектронное уравнение Рутаана для закрытых оболочек. Одно- и многоцентровые интегралы межэлектронного взаимодействия.
13. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета. Выбор БАО для неэмпирических и полуэмпирических расчетов. Возможность расчета спектральных характеристик молекул. Влияние на результаты размера БАО.
14. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета. Выбор БАО для неэмпирических и полуэмпирических расчетов. Хартри-Фоковский предел точности неэмпирических расчетов. Возможность расчета структурных, физических и термодинамических характеристик молекул.
15. Неэмпирические методы расчета. Достоинства и недостатки. Электронная корреляция и ее вклад в полную энергию системы. Методы учета электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия (CI).
16. Неэмпирические методы расчета. Достоинства и недостатки. Электронная корреляция и ее вклад в полную энергию системы. Методы учета электронной корреляции. Метод теории возмущений Меллера-Плессета (MP). Возмущения второго и четвертого порядка.
17. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета. Выбор БАО для неэмпирических и полуэмпирических расчетов. Хартри-Фоковский предел точности неэмпирических расчетов. Возможность расчета структурных, физических и термодинамических характеристик молекул.
18. Уравнение СПП 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.
19. Уравнение СПП 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.
20. Уравнение ССП МО ЛКАО Рутаана. Полуэмпирические методы его расчета. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрытием. Основные положения методов MNDO и AM1. Достоинства и недостатки.
  21. Методы расчета молекул. Одноэлектронные уравнения Рутаана. Одно- и многоцентровые кулоновские и обменные интегралы и их вклады в полную энергию. Способы сокращения их числа в полуэмпирических методах
  22. Полуэмпирические методы расчета. Нулевое дифференциальное перекрытие. Нарушение инвариантности уравнения Рутаана к операциям симметрии. Метод CNDO.
  23. 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 MM2, AMBER, BIO для различных молекулярных систем. Сравнение метода ММ с другими расчетными методами.
  24. Методы функционала плотности DFT. Связь полной энергии с функционалом матриц электронной плотности. Теорема Хоэнберга –Кона. Обменная и корреляционная части полной энергии. Параметризация метода.
  25. Квантово- химическое определение частот колебаний сложной молекулы. Нормальные колебания. Симметрия нормальных колебаний. Расчет количества колебаний с помощью теории групп на примере молекулы H<sub>2</sub>S или любой другой..
  26. Квантово- химический расчет электронных и молекулярных спектров молекул. Основные подходы и теоретические обоснования для расчета спектров УФ, ИК и ЯМР.
  27. Квантово- химический расчет теплот химической реакции в неэмпирических и полуэмпирических методах.

### 4.2.3 Примеры экзаменационных билетов



**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кубанский государственный университет»**

**Направление 04.04.01 «Химия»**

**Кафедра общей, неорганической химии и ИВТ в химии**

**Дисциплина: « Компьютерное моделирование структур молекул и химических процессов»**

**БИЛЕТ №3**

1. Методы молекулярной механики (ММ).
2. Молекулярные системы. Применение теории симметрии для построения молекулярных волновых функций.

*Зав. кафедрой,  
д.х.н., профессор*

*Н.Н. Буков*

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

### **5.1 Основная 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.

### **5.2 Дополнительная литература**

1. 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.
2. 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.
3. Грибов Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул. — Интеллект, 2010, 312 с.

### **5.3 Периодические издания**

Периодические журналы: "Журнал структурной химии"; "Координационная химия".

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

1. Электронная библиотечная система издательства "Лань".
2. Научная электронная библиотека (НЭБ).
3. Электронная библиотечная система "Университетская библиотека ONLINE".
4. Коллекция журналов издательства Elsevier на портале ScienceDirect.
5. <http://www.gaussian.com>
6. <http://www.qchem.ru/>
7. <http://www.msg.ameslab.gov/games/>
8. <http://quant.distant.ru>

## **7. 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.

### **Лабораторные работы**

#### **Рекомендации:**

- руководствоваться графиком лабораторных работ РПД;
- накануне перед очередной работой необходимо по конспекту или в методических указаниях к работе просмотреть теоретический материал работы;
- на лабораторном занятии, выполнив все опыты и расчеты, необходимо проанализировать окончательные результаты и убедиться в их достоверности;
- обратить внимание на оформление отчета, в котором должны присутствовать: цель работы, схема установки или ее математическая модель, журнал опытных и расчетных данных, реализация в опыте и расчетах цели работы, необходимые графические зависимости (при их наличии) и их ана-

лиз, результаты работы и выводы;

- при подготовке к отчету руководствоваться вопросами, приведенными в методических указаниях к данной работе, тренажерами программ на ЭВМ по отчету работ и компьютерным учебником.

### **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 скорейшего усвоения которых целесообразно вести краткий конспект.

### **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.

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

### **8.1 Перечень необходимого программного обеспечения**

В курсе лабораторных работ используется следующее программное обеспечение: Microsoft Windows, ACD Labs Chemsketch freeware, GAMESS, HyperChem 8.0, МОРАС.

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

<b>№</b>	<b>Вид работ</b>	<b>Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащённость</b>
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория, оснащённая: комплект учебной мебели, доска интерактивная SMART Board с короткофокусным проектором, ноутбук. (ауд. 422С, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149).
2.	Лабораторные занятия	Компьютерный зал с терминальными станциями с операционной системой Windows 7 или более поздней версии и необходимым программным обеспечением (ауд. 103, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149).
3.	Групповые (индивидуальные) консультации	Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций, оснащённая комплектом учебной мебели, доской интерактивной SMART Board с короткофокусным проектором, ноутбуком. (ауд. 422С, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149).
4.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Учебная аудитория для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащённая комплектом

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
	станция	учебной мебели, доской интерактивной SMART Board с короткофокусным проектором, ноутбуком. (ауд. 422С, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149).
5.	Самостоятельная работа	Помещение для самостоятельной работы студентов, оснащенное учебной мебелью, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспеченное доступом в электронную информационно-образовательную среду университета. (ауд. 401с, 431с, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149)