

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 » апреля 2018г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Б1.В.ДВ.04.02 КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ

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 «Компьютерная химия» составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.04.01 Химия

Программу составил:

В.Т. Панюшкин, профессор кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии, д-р хим. наук, профессор

Рабочая программа дисциплины «Компьютерная химия» утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии

протокол № _____ «____» _____ 2018г.

Заведующий кафедрой Буков Н.Н.



Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии

протокол № _____ «____» _____ 2018г.

Заведующий кафедрой Буков Н.Н.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий

протокол № _____ «____» _____ 2018г.

Председатель УМК факультета Стороженко Т.П.



Рецензенты:

Боковикова Татьяна Николаевна, профессор кафедры химии, метрологии и стандартизации ФГБОУ ВО «КубГТУ», д-р. тех. наук, профессор

Тумаев Евгений Николаевич, профессор кафедры теоретической физики и компьютерных технологий ФГБОУ ВО «КубГУ», д-р физ.-мат. наук

1 Цели и задачи изучения дисциплины (модуля).

1.1 Цель освоения дисциплины.

формирование знаний и умений в области использования ЭВМ для решения различных химических проблем

1.2 Задачи дисциплины.

Познакомить студентов с

- основными направлениями использования компьютеров в химии, возможностями и недостатками основных химических программных пакетов;
- методиками проведения квантово-химических расчетов с использованием готовых прикладных программ;

перспективами развития программных продуктов вычислительной квантовой химии.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Компьютерная химия» относится к дисциплинам по выбору вариативной части Блока Б1 учебного плана направления 04.04.01 Химия, направленность «Неорганическая химия».

Знания и навыки, полученные в результате освоения данного курса, могут быть использованы при решении различных задач общеобразовательных и специальных химических дисциплин, 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 общепрофессиональных и профессиональных компетенций (ОПК и 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 использования компьютеров в химии	осуществить методику расчетов молекулярных и геометрических характеристик молекул различными методами квантовой химии в рамках прикладных пакетов	навыками работы с прикладными пакетами
2.	ПК-1	способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план	основные методы теоретических расчетов, применяемых в квантовой химии	самостоятельно проводить компьютерные расчеты по известным методикам квантовой химии	навыками теоретических квантово-механических расчетов

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
		исследования и получать новые научные и прикладные результаты			
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)	формулировки основных теорем квантовой химии и основных методов компьютерного расчета молекулярного моделирования	приобретать новыми знаниями из теоретических расчетов, а также путем литературного поиска и использования современных информационных образовательных технологий	навыками использования квантово-химических знаний и умений в практической 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)			
			В			
Контактная работа, в том числе:		84,3	84,3			
Аудиторные занятия (всего):		84	84			
Занятия лекционного типа		28	28			
Лабораторные занятия		-	-			
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		56	56			
Иная контактная работа:		0,3	0,3			
Контроль самостоятельной работы (КСР)		-	-			
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,3	0,3			
Самостоятельная работа, в том числе:		33	33			
Проработка учебного (теоретического) материала		10	10			
Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)		10	10			
Подготовка к текущему контролю		13	13			
Контроль:		26,7	26,7			
Подготовка к экзамену		26,7	26,7			
Общая трудоемкость	час.	144	144			
	в том числе контактная работа	84,3	84,3			
	зач. ед	4	4			

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы (темы) дисциплины, изучаемые в 8 семестре

№ раз-дела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			СРС
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1	Введение. Применение ЭВМ в квантовой химии	18	4	6		8
2	Применение ЭВМ в химической кинетике и термодинамике	38	10	20		8
3	Применение ЭВМ в органической химии	32	10	14		8
4	Применение ЭВМ в аналитической химии	29	4	16		9
	<i>Всего:</i>	117	28	56		33

2.3 Содержание разделов (тем) дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа.

№	Наименование раздела (темы)	Содержание раздела (темы)	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Введение. Применение ЭВМ в квантовой химии	1.Квантово-химические аспекты вычислительного процесса молекулы. 2. Методы учета электронной корреляции (теория возмущения и метод конфигурационного взаимодействия. 3.Квантово-химические основы электронных и колебательных спектров. 4. Полуэмпирические и неэмпирические методы расчета в квантовой химии. 5. Характеристика основных прикладных программных пакетов по химии	УО, КР
2.	Применение ЭВМ в химической кинетике и термодинамике	1. Применение ЭВМ в химической кинетике и химической термодинамике. 2.Характеристика методов, используемых для моделирования химических реакций и получения термодинамических данных.	УО, КР

3.	Применение ЭВМ в органической химии	1.Компьютерное планирование органического синтеза (КПОС). Основные принципы. 2.Характеристика программ КПОС. Проблемы и возможные перспективы КПОС	УО, КР
4.	Применение ЭВМ в аналитической химии	1.Методология компьютерной идентификации веществ с применением информационно-поисковых систем. 2.Расчетные программы для ПЭВМ в вузовском курсе аналитической химии (пакет программ «ПРОТОЛИЗ», «PLAN», «SOLUTION» и др.)	УО, КР

УО – устный опрос, ЛР – защита лабораторной работы, КР – контрольная работа, К – коллоквиум.

2.3.2 Занятия семинарского типа.

№	Наименование раздела (темы)	Тематика практических занятий (семинаров)	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Введение. Применение ЭВМ в квантовой химии	Знакомство с вычислительным программным комплексом GAMESS (возможности и инструментальные составляющие)	<i>Устный опрос</i>
2.	Применение ЭВМ в химической кинетике и термодинамике	Расчет изменений параметров реагентов в ходе химической реакции Расчет изменений термодинамических параметров химических соединений.	<i>Устный опрос</i>
3.	Применение ЭВМ в органической химии	Расчет методами квантовой химии геометрического и электронного строения заданной молекулы в программном комплексе GAMESS Расчет колебательного спектра заданной молекулы в программном комплексе Расчет электронного спектра заданной молекулы в программном комплексе	<i>Устный опрос</i>
4.	Применение ЭВМ в аналитической химии	Изучение достоинств и недостатков методов КПОС Конформационный анализ химических соединений методом молекулярной механики	<i>Устный опрос</i>

2.3.3 Лабораторные занятия.

Не предусмотрены

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовые работы – не предусмотрены

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

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,
- в форме аудиофайла,
- в печатной форме на языке Брайля.

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,
- в форме аудиофайла.

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. В рамках лабораторных занятий применяются методы проектного обучения, исследовательские методы, тренинговые формы, метод конкретных ситуаций, игровые технологии. 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.

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля.

Текущий контроль осуществляется в виде устного опроса, решения задач, контрольных работ и коллоквиумов в рамках лабораторных занятий.

4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Вопросы к экзамену

- 1 Основные направления использования вычислительных технологий в химии.
- 2 Квантовая химия атома.
- 3 Квантовая химия молекул.
- 4 Блок-схема вычислительного процесса.
- 5 Поверхность потенциальной энергии. Понятие о стационарных точках.
- 6 Методы учета электронной корреляции (теория возмущения и метод конфигурационного взаимодействия).
- 7 Квантово-химические основы электронных и колебательных спектров.
- 8 Иерархия методов квантовой химии. Полуэмпирические методы расчета в квантовой химии. Методы CNDO, INDO, MNDO.
- 9 Неэмпирические методы расчета. Выбор базисных атомных функций. Номенклатура базисных наборов, их характеристика.
- 10 Характеристика программного пакета MOPAC. Возможности программных пакетов GAMESS и GAUSSIAN.
- 11 Характеристика методов, применяемых при обработке кинетических данных и моделировании кинетики реакции.
- 12 Стехиометрические расчеты, оценка параметров теоретических или эмпирических закономерностей на основе экспериментально определенных величин.
- 13 Методы численного интегрирования, используемые для моделирования элементарных реакций.
- 14 Способы расчета термодинамических параметров химических соединений методами квантовой химии.
- 15 Преимущества ЭВМ при планировании органического синтеза. Основные операции компьютерного планирования органического синтеза (КПОС).
- 16 Программы КПОС. Проблемы и возможные перспективы КПОС.
- 17 Методология компьютерной идентификации веществ с применением информационно-поисковых систем.
- 18 Расчетные программы для ПЭВМ в вузовском курсе аналитической химии (пакет программ «ПРОТОЛИЗ», «PLAN», «SOLUTION» и др.)
- 19 Основные направления использования ЭВМ в обучении химии (графические возможности, компьютерное моделирование химических процессов и явлений, осуществление химического эксперимента).
- 20 Преимущества и недостатки компьютера как средства обучения химии. Основные типы программ использования ЭВМ как средства обучения.

Уровень качества ответа студента на экзамене определяется с использованием следующей системы оценок:

1. Оценка "отлично" предполагает:
 - полные и точные ответы на 3 вопроса экзаменационного билета;
 - свободное владение основными терминами и понятиями курса;
 - последовательное и логичное изложение материала курса;
 - законченные выводы и обобщения по теме вопросов;
 - исчерпывающие ответы на вопросы при сдаче экзамена.
2. Оценка "хорошо" предполагает:
 - полные и точные ответы на 3 вопроса экзаменационного билета;
 - знание основных терминов и понятий курса;

- последовательное изложение материала курса;
- умение формулировать некоторые обобщения по теме вопросов;
- достаточно полные ответы на вопросы при сдаче экзамена;

3. Оценка "удовлетворительно" предполагает:

- полные и точные ответы на 2 вопроса экзаменационного билета;
- удовлетворительное знание основных терминов и понятий курса;
- удовлетворительное знание и владение методами и средствами решения задач;
- недостаточно последовательное изложение материала курса;
- умение формулировать отдельные выводы и обобщения по теме вопросов;

4. Оценка "неудовлетворительно" предполагает:

- полный и точный ответ на 1 вопрос экзаменационного билета и менее.

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 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.

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

5.1 Основная литература:

1. Соловьев М.М., Соловьев М.Е. Компьютерная химия. М.: Изд. Солон, 2005.—536с.

Для освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья имеются издания в электронном виде в электронно-библиотечной системе «Лань».

5.2 Дополнительная литература:

1. Эберт К., Эдерер Х. Компьютеры. Применение в химии. М.: Мир, 1988. - 416 с.
2. Кларк Т. Компьютерная химия. М. Мир: 1990.
3. ЭВМ помогает химии. /Под ред. Г. Вернера, М. Шанона. Л.: Химия, 1990.- 384с.

4. Математические методы и ЭВМ в аналитической химии: Сб. науч. тр./ Отв. ред. Л.А. Грибов. М.: Наука, 1989. – 300с.
5. Репинская И.Б. Ретросинтетический подход к планированию синтеза органических соединений. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1989.

5.3. Периодические издания:

1. Журнал неорганической химии. Ежемесячное издание Российской академии наук.
2. Журнал общей химии. Ежемесячное издание Российской академии наук.
3. Координационная химия. Ежемесячное издание Российской академии наук.

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

1. www.chem.msu.ru
2. www.chemport.ru
3. <http://onx.distant.ru/>
4. www.alhimik.ru

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

В соответствии с требованиями ФГОС ВО преподавание учебной дисциплины «Компьютерная химия» предусматривает компетентностный подход в учебном процессе, который основывается на инновационных психолого-педагогических технологиях, направленных на повышение эффективности и качества формирования профессиональных навыков обучающихся. Основными формами обучения являются: лекции, семинарские занятия.

В разработанной программе использованы активные и интерактивные формы обучения: дискуссии, проблемные лекции, решение практических задач и кейсов, работа в составе малых групп.

Для успешного освоения дисциплины «Компьютерная химия» каждый студент обеспечивается учебно-методическими материалами (тематическими планами лекций, семинарских и лабораторных занятий, учебно-методической литературой, типовыми задачами).

Различные виды учебной работы, включая самостоятельную работу студента, способствуют овладению культурой мышления, способностью в письменной и устной речи логически правильно оформить основные положения дидактических единиц дисциплины, т.е. формируется системный подход к анализу химической информации, восприятию инноваций, что способствует готовности к самосовершенствованию, самореализации, личностной и предметной рефлексии.

Тематика лекций, семинарских занятий соответствует содержанию программы дисциплины.

Лекции читают по наиболее важным разделам программы. Они носят проблемный характер и формируют у студентов системное представление об изучаемых разделах предмета, обеспечивают усвоение ими основных принципов и положений дисциплины «Неорганическая химия», а также готовность к восприятию научно-технических инноваций и технологий.

Семинарские занятия и лабораторные работы обеспечивают приобретение и закрепление необходимых навыков и умений, формируют профессиональные компетенции,

готовность к самостоятельной и индивидуальной работе, принятию ответственных решений в рамках профессиональной деятельности.

На семинарских занятиях преподаватель обращает внимание на способность студента к логическому мышлению и самостоятельности, применяя в своей педагогической деятельности инновационный личностно – ориентированный подход обучения.

Отдельные темы разделов дисциплины студенты прорабатывают самостоятельно. Содержание самостоятельной работы: чтение основной и рекомендуемой дополнительной литературы, решение ситуационных задач, что способствует развитию познавательной активности, творческого мышления студентов, прививает навыки самостоятельного поиска информации, а также формирует способность и готовность к самосовершенствованию, самореализации и творческой адаптации.

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала.

Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

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

8.1 Перечень информационных технологий.

- Использование электронных презентаций при проведении лекционных занятий
- Использование электронных презентаций при защите индивидуальных экспериментальных задач.

8.2 Перечень необходимого программного обеспечения.

Программы для демонстрации и создания презентаций («Microsoft Power Point»)

8.3 Перечень информационных справочных систем:

1. Электронная библиотечная система eLIBRARY.RU (<http://www.elibrary.ru>).
2. Электронная библиотечная система Издательства «Лань» <http://e.lanbook.com/>.
3. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» www.biblioclub.ru.
4. Электронная библиотечная система «Юрайт» <http://www.biblio-online.ru>.

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

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа – ауд. 322, корп. С (улица Ставропольская, 149) – поточная аудитория, оснащённая проектором и мультимедийной кафедрой, оборудованием, посудой и реактивами для показа демонстрационного эксперимента, демонстрационными плакатами, моделями и установками.

2.	Семинарские занятия	Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа – ауд. 126, корп. С (улица Ставропольская, 149) – поточная аудитория, оснащенная интерактивной доской и проектором.
3.	Групповые (индивидуальные) консультации	Групповые (индивидуальные) консультации проводятся в учебных лабораториях по неорганической химии – ауд. 439 и 430, корп. С (улица Ставропольская, 149).
4.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Текущий контроль и промежуточная аттестация проводятся в учебных лабораториях по неорганической химии – ауд. 439 и 430, корп. С (улица Ставропольская, 149), а также в учебной аудитории для проведения занятий семинарского типа – ауд. 126, корп. С (улица Ставропольская, 149).
5.	Самостоятельная работа	Кабинет для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», программой экранного увеличения и обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.