

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебной работе,  
качеству образования – пер-  
вый проректор

Хагуров Т.А.

«06» мая \_\_\_\_\_ 2023 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ


### Б1.О.08 «КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ»

Направление подготовки –	04.04.01 Химия
Направленность (профиль) –	«Перспективные соединения и материалы на их основе»
Форма обучения – очная	
Квалификация выпускника – магистр	

Краснодар 2023

**Рабочая программа дисциплины Б1.О.08 «Компьютерная химия»** составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.04.01 – Химия.

Программу составил:

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

Рабочая программа дисциплины Б1.О.08 «Компьютерная химия» утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии протокол № 7 от «04» апреля 2023 г.

Заведующий кафедрой  Волынкин В.А.

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий, протокол № 7 «17» апреля 2023 г.

Председатель УМК факультета Беспалов А.В. 

Рецензенты:

Крапивин Г.Д, главный научный сотрудник ЦКП «ИЦПиХТ»  
ФГБОУ ВО «КубГТУ», д.х.н., профессор

Болотин С.Н, зав. кафедрой экологии и природопользования  
ФГБОУ ВО «КубГУ», к.х.н, доцент

## **1. Цели и задачи освоения дисциплины**

### **1.1 Цель освоения 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**

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.

### **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 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
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 разнородные экспериментальные факты, обобщать значительное число данных, осмысливать теоретические положения для решения задач в сфере профессиональной деятельности

## 2. Структура и содержание дисциплины

### 2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зач. ед. (144 часа), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры (часы)			
		2			
<b>Контактная работа, в том числе:</b>					
<b>Аудиторные занятия (всего):</b>	<b>48</b>	<b>48</b>			
Занятия лекционного типа	16	16	-	-	-
Лабораторные занятия	32	32	-	-	-
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)	-	-	-	-	-
<b>Иная контактная работа:</b>					
Контроль самостоятельной работы (КСР)	-	-			
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,2	0,2			
<b>Самостоятельная работа, в том числе:</b>					
Курсовая работа	-	-	-	-	-
Проработка учебного (теоретического) материала	40	40	-	-	-
Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)	30	30	-	-	-
Реферат	10	10	-	-	-
<b>Контроль:</b>					
Подготовка к экзамену					
<b>Общая трудоёмкость</b>	<b>час.</b>	<b>144</b>	<b>144</b>	<b>-</b>	<b>-</b>
	<b>в том числе контактная работа</b>	<b>48,2</b>	<b>48,2</b>		
	<b>зач. ед</b>	<b>4</b>	<b>4</b>		

### 2.2 Структура дисциплины.

Распределение видов учебной работы и их трудоёмкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые во 2 семестре (для студентов ОФО)

№	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
	<i>ИТОГО по разделам дисциплины</i>		16		32	95,8
	Контроль самостоятельной работы (КСР)		-	-	-	-
	Промежуточная аттестация (ИКР)	0.2	-	-	-	-
	Подготовка к текущему контролю		-	-	-	-
	Общая трудоемкость по дисциплине	144	-	-	-	-

Примечание: Л – лекции, ПЗ – практические занятия / семинары, ЛР – лабораторные занятия, СРС – самостоятельная работа студента

## 2.3 Содержание разделов дисциплины

### 2.3.1 Занятия лекционного типа

№ раздела	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1	Введение в квантово-химические методы вычислений.	Основные принципы квантовой механики. Атомные орбитали. Квантовые числа. Многоэлектронные атомы. Свойства многоэлектронных атомов.	<i>Коллоквиум</i>
2	Теория химической связи.	Метод МО ЛКАО. Базисные наборы атомных орбиталей.	<i>Рефераты, доклады</i>
3	Введение в квантово-химические методы вычислений	Полуэмпирические методы. Симметрия молекулярных систем. Программное обеспечение расчетов.	<i>Коллоквиум с докладами в виде презентации</i>
4	Электронная корреляция.	Электронная корреляция. Методы учета электронной корреляции.	
5	Теория функционала плотности.	Теория функционала плотности.	

### 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**

В ходе изучения дисциплины предусмотрено использование следующих образовательных технологий: лекции, практические занятия, проблемное обучение, самостоятельная работа студентов.

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). Компетентностный подход в рамках преподавания дисциплины реализуется в использовании интерактивных технологий и активных методов (проектных методик, разбора конкретных ситуаций) в сочетании с внеаудиторной работой. В процессе самостоятельной деятельности студенты осваивают и анализируют передовой опыт, используя имеющуюся литературу и информационные технологии, выступают с презентациями, накапливают портфолио разработок.

Информационные технологии, применяемые при изучении дисциплины: использование информационных ресурсов, доступных в информационно-телекоммуникационной сети Интернет.

Адаптивные образовательные технологии, применяемые при изучении дисциплины – для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

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

Оценочные средства предназначены для контроля и оценки образовательных достижений обучающихся, освоивших программу учебной дисциплины «Компьютерная химия».

Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Оценочные средства включают контрольные материалы для проведения текущего контроля в форме тестовых заданий, доклада-презентации по проблемным вопросам, разно-



уровневых заданий, ситуационных задач и промежуточной аттестации в форме вопросов и заданий зачету.

**Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы**

### **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 кристаллов. Особенности органических кристаллов.

### **Примеры вариантов контрольных работ, тестов**

#### **ВАРИАНТ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ № 1**

Для указанных молекул ( $H_2O$ ,  $NO_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O_2$ ,  $NH_3$ ,  $HPO_3$ ) 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 уг-

лов для каждого метода. Полученные данные сравнить между собой и справочными данными. Сделать вывод об эффективности и адекватности различных методов.

## **Зачетно-экзаменационные материалы для промежуточной аттестации.**

### **Вопросы для подготовки к зачету**

1. 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.
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 ММ2, 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 теоретическое обоснования для расчета спектров УФ, ИК и ЯМР.
7. 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.
8. 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.

9. 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.
10. 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>.
11. Молекулярные системы. Использование приближения ССП Хартри – Фока в методе МО ЛКАО. Одноэлектронное уравнение Рутаана для закрытых оболочек. Одно- и многоцентровые интегралы межэлектронного взаимодействия.
12. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета. Выбор БАО для неэмпирических и полуэмпирических расчетов. Хартри-Фоковский предел точности неэмпирических расчетов.
13. Возможность расчета спектральных характеристик молекул. Возможность расчета структурных, физических и термодинамических характеристик молекул. Влияние на результаты размера БАО.
14. Неэмпирические методы расчета. Достоинства и недостатки. Электронная корреляция и ее вклад в полную энергию системы. Методы учета электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия (CI). Метод теории возмущений Меллера-Плессета (MP). Возмущения второго и четвертого порядка.
15. Уравнение ССП МО ЛКАО Рутаана. Полуэмпирические методы его расчета. Учет интегралов перекрытия. Основные положения метода INDO. Различные виды параметризации метода INDO . Необходимые исходные данные для расчета одно и двухэлектронных интегралов. Достоинства и недостатки метода.
16. Уравнение ССП 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.
17. Уравнение ССП МО ЛКАО Рутаана. Полуэмпирические методы его расчета. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрытием. Основные положения методов MNDO и AM1. Достоинства и недостатки.
18. Методы расчета молекул. Одноэлектронные уравнения Рутаана. Одно- и многоцентровые кулоновские и обменные интегралы и их вклады в полную энергию. Способы сокращения их числа в полуэм-

пирических методах

19. Полуэмпирические методы расчета. Нулевое дифференциальное перекрывание. Нарушение инвариантности уравнения Рутаана к операциям симметрии. Метод CNDO.
20. 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 ММ2, AMBER, BIO для различных молекулярных систем. Сравнение метода ММ с другими расчетными методами.
21. Методы функционала плотности DFT. Связь полной энергии с функционалом матриц электронной плотности. Теорема Хоэнберга –Кона. Обменная и корреляционная части полной энергии. Параметризация метода.
22. 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..
23. Квантово- химический расчет электронных и молекулярных спектров молекул. Основные подходы и теоретические обоснования для расчета спектров УФ, ИК и ЯМР.
24. Квантово- химический расчет теплот химической реакции в неэмпирических и полуэмпирических методах.

### **Критерии оценивания результатов обучения**

«зачтено»: студент владеет теоретическими знаниями по данному разделу, знает и понимает изученные концепции и теории, допускает незначительные ошибки; студент умеет правильно объяснять материал, иллюстрируя его примерами, умеет аргументировать собственную точку зрения.

«не зачтено»: материал не усвоен или усвоен частично, студент затрудняется привести примеры по данному разделу, довольно ограниченный объем знаний программного материала.

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 предусматрива-

ется 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 Учебная 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.
3. 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.
4. 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.
5. Грибов Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул. – Интеллект, 2010, 312 с.

## 5.2. Периодическая литература

1. Базы данных компании «Ист Вью» <http://dlib.eastview.com>
2. Журнал структурной химии
3. Координационная химия

## 5.3. Интернет-ресурсы, в том числе современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

### Электронно-библиотечные системы (ЭБС):

1. ЭБС «УНИВЕРСИТЕТСКАЯ БИБЛИОТЕКА ОНЛАЙН»  
[www.biblioclub.ru](http://www.biblioclub.ru)
2. ЭБС «ZNANIUM.COM» [www.znanium.com](http://www.znanium.com)
3. ЭБС «ЛАНЬ» <https://e.lanbook.com>

### Профессиональные базы данных:

1. Scopus <http://www.scopus.com/>
2. ScienceDirect [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)
3. Научная электронная библиотека (НЭБ) <http://www.elibrary.ru/>
4. Springer Journals <https://link.springer.com/>
5. zbMath <https://zbmath.org/>
6. "Лекториум ТВ" <http://www.lektorium.tv/>

### Ресурсы свободного доступа:

1. <http://www.gaussian.com>
2. <http://www.qchem.ru/>
3. <http://www.msg.ameslab.gov/gamess/>
4. <http://quant.distant.ru>

### Собственные электронные образовательные и информационные ресурсы КубГУ:

1. Среда модульного динамического обучения <http://moodle.kubsu.ru>
2. База учебных планов, учебно-методических комплексов, публикаций и конференций <http://mschool.kubsu.ru/>
3. Библиотека информационных ресурсов кафедры информационных образовательных технологий <http://mschool.kubsu.ru;>
4. Электронный архив документов КубГУ <http://docspace.kubsu.ru/>
5. Электронные образовательные ресурсы кафедры информационных систем и технологий в образовании КубГУ и научно-методического журнала "ШКОЛЬНЫЕ ГОДЫ" <http://icdau.kubsu.ru/>

## **6. 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.

### **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.

## **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 скорейше-



го усвоения которых целесообразно вести краткий конспект.

### 7. Материально-техническое обеспечение по дисциплине (модулю)

Наименование специальных помещений	Оснащенность специальных помещений	Перечень лицензионного программного обеспечения
Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: интерактивная доска SMART Board, короткофокусный интерактивный проектор, ноутбук, меловая доска (ауд. 422С).	Microsoft Windows, Microsoft PowerPoint
Учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: интерактивная доска SMART Board, короткофокусный интерактивный проектор, ноутбук, меловая доска (ауд. 422С).	Microsoft Windows, Microsoft PowerPoint
Учебные аудитории для проведения лабораторных работ. Компьютерные классы.	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: терминальные станции с операционной системой Windows и необходимым программным обеспечением (ауд. 103).	Microsoft Windows, Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint), ACD Labs Chemsketch freeware, GAMESS, HyperChem 8.0, МОРАС
Учебные аудитории для курсового проектирования (выполнения курсовых работ)	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и дос-	Microsoft Windows, Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint), ACD Labs Chemsketch freeware, GAMESS, HyperChem 8.0, МОРАС

	тупом в электронную информационно-образовательную среду университета (проводное соединение и беспроводное соединение по технологии Wi-Fi). (ауд. 428с, 431с)	
--	--	--