

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова»

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
биологии и экологии



О.А. Маракаев
«19» мая 2023 г.

Рабочая программа дисциплины

«Компьютерная химия»

программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре
по научной специальности 1.4.3 Органическая химия

Форма обучения очная

Программа одобрена на заседании института
фундаментальной и прикладной химии
протокол № 7 от «17» апреля 2023 года

Ярославль

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Компьютерная химия» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (далее - образовательная программа послевузовского профессионального образования) являются:

- ознакомление аспирантов с основными направлениями применения компьютерных технологий в химии.

2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Данная дисциплина является дисциплиной по выбору.

3. Планируемые результаты освоения дисциплины:

В результате освоения дисциплины аспирант должен:

Знать:

- основные направления применения компьютерных технологий в химических исследованиях и промышленной химии.

Уметь:

- грамотно и эффективно использовать прикладные программные продукты и информационные ресурсы при решении экспериментальных и теоретических проблем в области химии.

Владеть:

- навыками применения компьютерных технологий в научных исследованиях, образовании, производственных секторах реальной экономики химического профиля.

4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 акад. часов.

Дисциплина изучается в течение 2-го семестра.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий и их трудоемкость (в академических часах)					Формы текущего контроля успеваемости
			лекции	практические	лабораторные	консультации	самостоятельная работа	Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
1.	Тема 1. Предмет компьютерной химии	2	1			1	16	Реферат
2.	Тема 2. Химические редакторы и базы данных	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной работы
3	Тема 3. Математические методы компьютерного моделирования свойств	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной работы

	вещества и химических превращений							
4	Тема 4. Формально-логические подходы к конструированию органических молекул и поиску новых органических реакций	2	1			1	16	Задание в рамках самостоятельной работы
5	Тема 5. Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры.	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной работы
6	Тема 6. Компьютерные технологии в обмене научной информацией	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной работы
								Зачет
	Всего		6			2	100	

Содержание разделов дисциплины:

Тема 1. Предмет компьютерной химии. История ее возникновения. Современный этап развития. Когда и как должна использоваться вычислительная химия.

Тема 2. Химические редакторы и базы данных. Современные основные программные продукты.

Тема 3. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений. Изучение свойств молекул при помощи методов компьютерной химии.

Тема 4. Формально-логические подходы к конструированию органических молекул и поиску новых органических реакций. Оптимизация схем синтеза органических веществ. Комбинаторная химия. Корреляция структуры природных соединений с их физико-химическими свойствами и биологической активностью. Поиск новых биологически активных веществ. Компьютерная биохимия.

Тема 5. Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры. Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей. Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований.

Тема 6. Компьютерные технологии в обмене научной информацией. Основные интернет-ресурсы химического профиля, повышение эффективности доступа к ним. Поиск, хранение и обработка химической информации. Особенности представления химической информации.

5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

Вводная лекция – дает первое целостное представление о дисциплине и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой литературы.

Академическая лекция с элементами лекции-беседы – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Элементы лекции-беседы обеспечивают контакт преподавателя с аудиторией, что позволяет привлекать внимание аспирантов к наиболее важным темам дисциплины, активно вовлекать их в учебный процесс, контролировать темп изложения учебного материала в зависимости от уровня его восприятия.

Проблемная лекция – изложение материала, предполагающее постановку проблемных и дискуссионных вопросов, освещение различных научных подходов, связанные с различными моделями интерпретации изучаемого материала. Проблемная лекция начинается с вопросов, с постановки проблемы, которую в ходе изложения материала необходимо решить. В лекции сочетаются проблемные и информационные начала. При этом процесс познания аспирантом в сотрудничестве и диалоге с преподавателем приближается к поисковой, исследовательской деятельности.

Консультации – вид учебных занятий, являющийся одной из форм контроля самостоятельной работы аспирантов. На консультациях по просьбе аспирантов рассматриваются наиболее сложные разделы дисциплины, преподаватель отвечает на вопросы аспирантов, которые возникают у них в процессе самостоятельной работы.

В процессе обучения используются следующие технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии:

Электронный учебный курс «Компьютерная химия» в LMS Электронный университет Moodle ЯрГУ, в котором:

- представлены задания для самостоятельной работы аспирантов по темам дисциплины;
- представлен список литературы, рекомендуемой для освоения дисциплины;
- представлена информация о форме и времени проведения консультаций по дисциплине в случае их проведения в дистанционном формате в режиме онлайн.

6. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины

а) основная литература

Бутырская Е.В. Компьютерная химия [Электронный ресурс] : основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е.В. Бутырская. — Электрон. текстовые данные. — М. : СОЛОН-ПРЕСС, 2011. — 224 с. — 978-5-91359-095-4. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/20870.html>

Орлов В.Ю., Русаков А.И., Тихонов С.В. Компьютерные технологии в образовательной и научной деятельности. – Ярославль, : ЯрГУ, 2005. - 124 с. [javascript:](#)

б) дополнительная литература

Белашенко Д.К. Компьютерные методы в физике и физической химии [Электронный ресурс] : лабораторный практикум / Д.К. Белашенко. — Электрон. текстовые данные. — М. : Издательский Дом МИСиС, 2012. — 109 с. — 2227-8397. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/56068.html>

в) ресурсы сети «Интернет» (при необходимости)

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ (http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php).
2. Химический факультет МГУ (<http://www.chem.msu.ru/>).

7. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав следующие помещения:

- учебные аудитории для проведения лекций;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы.

Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ЯрГУ.

Автор:

Профессор института
фундаментальной и прикладной химии, д.х.н.
(должность, ученая степень)

(подпись)



В.Ю. Орлов
(Фамилия И.О.)

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины
«Компьютерная химия»**

**Оценочные материалы
для проведения текущей и/или промежуточной аттестации
аспирантов по дисциплине**

**1. Контрольные задания и (или) иные материалы,
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

Задания для самостоятельной работы.

Задание № 1

Подготовить презентацию доклада с использованием химических редакторов

Задание № 2

Провести расчет заданной структуры методами квантовой химии.

Задание № 3

Найти связь между параметрами структуры ряда соединений и их свойствами.

Задание № 4

Провести статистическую обработку данных количественного анализа.

Задание № 5

Поиск заданной информации.

Темы рефератов

1. Модели, гипотезы, приближения и реальность в химии.
2. Обзор существующих в компьютерной химии методов.
3. Методы, генетически связанные с квантовой химией.
4. Поиск структуры переходных состояний методами компьютерной химии.
5. Расчеты кинетики химических реакций.
6. Изучение свойств возбужденных состояний методами современной компьютерной химии.
7. Определение свойств молекул и их реакций для химических, биологических, медицинских и т.д. исследований.
8. Информационные потоки в химии и их неоднородность

2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

Список вопросов к зачету:

1. Использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации.
2. Принципы организации баз научных и справочных данных.
3. Компьютерное обеспечение аналитического оборудования.
4. Статистическая обработка результатов измерений.
5. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества.
6. Квантово-химическое моделирование.
7. Химические редакторы.
8. Отображение результатов исследований.
9. QSAR.
10. Программное обеспечение к конструированию органических молекул.

11. Компьютерные технологии в обмене научной информацией.

12. Химические ресурсы Интернет.

2.1 Описание процедуры выставления оценки

По итогам зачета выставляется одна из оценок: «зачтено», «незачтено».

Правила выставления оценки на зачете:

Устный ответ студента на зачете оценивается по 2-х балльной системе.

Отметка «зачтено» ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;
- аспирант свободно владеет научной терминологией;
- ответ аспиранта структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов;
- ответ аспиранта логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ аспиранта характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ аспиранта иллюстрируется примерами, в том числе из собственной научно-исследовательской деятельности;
- аспирант демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию;
- аспирант демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.

Отметка «незачтено» ставится, если:

- ответ аспиранта обнаружил незнание или непонимание сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые аспирант не может исправить самостоятельно;
- на большую часть дополнительных вопросов по содержанию зачета аспирант затрудняется дать ответ или не дает верных ответов;
- аспирант не демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.