МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Самарский государственный технический университет»
(ФГБОУ ВО «СамГТУ»)

УТВЕРЖДАЮ:
Первый проректор-проректор по учебной работе
_____ / Д.Е. Овчинников
"_____" _____ 20___ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.01.02 «Вычислительные методы в химии»

Код и направление подготовки (специальность)	04.03.01 Химия
Направленность (профиль)	Органическая и биоорганическая химия
Квалификация	Бакалавр
Форма обучения	Очная
Год начала подготовки	2025
Институт / факультет	Химико-технологический факультет
Выпускающая кафедра	кафедра "Органическая химия"
Кафедра-разработчик	кафедра "Органическая химия"
Объем дисциплины, ч. / з.е.	144 / 4
Форма контроля (промежуточная аттестация)	Экзамен

Самара 2025

Б1.В.01.02 «Вычислительные методы в химии»

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки (специальности) **04.03.01 Химия**, утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ от № 671 от 17.07.2017 и соответствующего учебного плана.

Разработчик РПД:

Профессор, доктор химических наук, профессор	А.К Ширяев
(должность, степень, ученое звание)	(ФИО)
Заведующий кафедрой	Ю.Н. Климочкин, доктор химических наук, профессор
	(ФИО, степень, ученое звание)

СОГЛАСОВАНО:

Председатель методического совета факультета / института (или учебно-методической комиссии)	О.В Лаврентьева, кандидат химических наук, доцент
	(ФИО, степень, ученое звание)
Руководитель образовательной программы	А.Н. Резников, доктор химических наук, доцент
	(ФИО, степень, ученое звание)

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы 4
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы 6
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся 7
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам), с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий 7
4.1 Содержание лекционных занятий 8
4.2 Содержание лабораторных занятий 9
4.3 Содержание практических занятий 11
4.4. Содержание самостоятельной работы 11
5. Перечень учебной литературы и учебно-методического обеспечения по дисциплине (модулю) 11
6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения 12
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», профессиональных баз данных, информационно-справочных систем 12
8. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю) 13
9. Методические материалы 13
10. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) 14

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть, соотнесенные с индикаторами достижения компетенции)
Профессиональные компетенции			
Не предусмотрено	ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.2 Использует специализированное программное обеспечение и базы данных для получения и первичной обработки экспериментальных данных	Владеть навыками поиска информации по заданной тематике
			Знать теоретические основы традиционных и новых разделов химии и способы их использования при осуществлении научно-исследовательские работы
			Уметь применять знания общих и специфических закономерностей различных областей химической науки при осуществлении научно-исследовательские ра-боты
	ПК-3 Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-3.2 Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов	Владеть навыками использования теоретических основ базовых химических дисциплин для установления структуры органических соединений
			Знать современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений
			Уметь проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации

	ПК-7 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-конструкторские работы и технологические испытания	ПК-7.1 Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных)	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных).
			Знать основные методы информационной поддержки специалистов, осуществляющих научно-конструкторские работы и технологические испытания
			Уметь составлять обзор литературных источников по заданной теме, оформляет отчеты о выполненной работе по заданной форме
Универсальные компетенции			
Системное и критическое мышление	УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.2 Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов	Владеть приемами анализа и синтеза информации при выполнении профессиональной деятельности.
			Знать содержание процессов критического анализа и синтеза информации, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности
			Уметь планировать цели и устанавливать приоритеты при анализе и синтезе информации, применять системный подход для решения поставленных задач.
		УК-1.3 Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи	Владеть приемами анализа и синтеза информации при выполнении профессиональной деятельности.
			Знать содержание процессов критического анализа и синтеза информации, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности

			Уметь планировать цели и устанавливать приоритеты при анализе и синтезе информации, применять системный подход для решения поставленных задач.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы: **часть, формируемая участниками образовательных отношений**

Код компетенции	Предшествующие дисциплины	Параллельно осваиваемые дисциплины	Последующие дисциплины
ПК-2	Информационные технологии в химии; Практико-ориентированный проект; Учебная практика: проектная практика; Химическое моделирование	Практико-ориентированный проект; Производственная практика: научно-исследовательская работа	Биоорганическая химия; История и методология химии; Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы; Практико-ориентированный проект; Практикум: синтез органических препаратов; Производственная практика: преддипломная практика; Современные методы идентификации и выделения органических соединений
ПК-3	Информационные технологии в химии; Промышленный органический синтез; Химическое моделирование	Производственная практика: научно-исследовательская работа	Биоорганическая химия; Катализ в органическом синтезе; Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы; Практикум: синтез органических препаратов; Производственная практика: преддипломная практика; Современные методы идентификации и выделения органических соединений
ПК-7	Информационные технологии в химии; Практико-ориентированный проект; Учебная практика: проектная практика; Химическое моделирование	Практико-ориентированный проект	Биоорганическая химия; История и методология химии; Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы; Практико-ориентированный проект; Практикум: синтез органических препаратов; Современные методы идентификации и выделения органических соединений

УК-1	Введение в информационные технологии; Информационные технологии в химии; Кристаллохимия; Математика; Неорганическая химия; Общая химия; Органическая химия; Основы аналитической химии; Практико-ориентированный проект; Промышленный органический синтез; Социология и право; Строение вещества; Теоретические основы инструментальных методов анализа; Учебная практика: ознакомительная практика; Учебная практика: проектная практика; Физика; Физическая химия; Философия; Химическое моделирование	Практико-ориентированный проект; Производственная практика: научно-исследовательская работа; Производственная практика: технологическая практика; Химия окружающей среды	Биоорганическая химия; Высокомолекулярные соединения; История и методология химии; Катализ в органическом синтезе; Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы; Практико-ориентированный проект; Практикум: синтез органических препаратов; Производственная практика: преддипломная практика; Современные методы идентификации и выделения органических соединений; Химические основы биологических процессов

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Вид учебной работы	Всего часов / часов в электронной форме	6 семестр часов / часов в электронной форме
Аудиторная контактная работа (всего), в том числе:	48	48
Лабораторные работы	32	32
Лекции	16	16
Внеаудиторная контактная работа, КСР	8	8
Самостоятельная работа (всего), в том числе:	43	43
подготовка к лабораторным работам	43	43
Контроль	45	45
Итого: час	144	144
Итого: з.е.	4	4

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам), с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

№ раздела	Наименование раздела дисциплины	Виды учебной нагрузки и их трудоемкость, часы				
		ЛЗ	ЛР	ПЗ	СРС	Всего часов

1	Квантово-химические расчёты	12	28	0	33	73
2	Методы силового поля	4	4	0	10	18
	КСР	0	0	0	0	8
	Контроль	0	0	0	0	45
	Итого	16	32	0	43	144

4.1 Содержание лекционных занятий

№ занятия	**Наименование раздела**	**Тема лекции**	**Содержание лекции** (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов)	**Количество часов / часов в электронной форме**
6 семестр				
1	Квантово-химические расчёты	Подготовка данных для квантово-химических программ.	Подготовка данных для квантово-химических программ. Работа в структурном и графическом ре-жимах химического редактора ChemSketch. Рисование структур, их трёхмерная оптимизация, построение начальной геометрии для оптимизации геометрических параметров квантово-химическими методами. Картезианские координаты и Z-матрица.	2
2	Квантово-химические расчёты	Структура программы GAMESS	Структура программы GAMESS. Команды и группы команд про-граммы GAMESS. Основные типы расчётов, реализуемые в про-грамме. Теоретические методы и базисы. Алгоритм квантово-химических расчётов. Оптимизация структуры молекулы методом Ньютона-Рафсона.	2
3	Квантово-химические расчёты	Программа визуализации квантово-химических расчетов	Программа визуализации квантово-химических расчетов Mac-MolPLT. Перенос структур из других программ, рисование структур, их оптимизация путем редактирования Z-матрицы. Изменение нумерации атомов, "замораживание" отдельных координат для поиска переходных состояний. Создание исходного файла для программы GAMESS.	2
4	Квантово-химические расчёты	Анализ результатов квантово-химических расчётов	Анализ результатов квантово-химических расчётов, построение графика изменения энергии в процессе расчета, визуализация молекулярных орбиталей, пересчет канонических орбиталей в локализованные. Создание слайдов и видироликов, иллюстрирующих превращение одной структуры в другую.	2
5	Квантово-химические расчёты	Оптимизация геометрии молекул	Расчет геометрии молекул, зависимость сходимости от размера базиса и качества начальной геометрии. Расчет корреляционной энергии. Методы КВ, МР2, связанных кластеров, ДФТ. Проблема поиска структур переходных состояний. Расчет конформационного равновесия.	2

6	Квантово-химические расчёты	Расчет термохимических параметров	Расчет термохимических параметров, приведение результатов расчета к нормальным условиям (298.15 K). Расчет сольватационных эффектов. Применение результатов расчета конформационного равновесия для вычисления углов удельного вращения и подтверждения конфигурации соединения.	2
7	Методы силового поля	Энергетические вклады в методах силового поля	Энергетические вклады, оптимизация геометрии, типы силовых полей. Программы, реализующие методы силового поля: Avogadro, TINKER. Анализ конформационного равновесия, геометрии органических молекул. Типы силовых полей	2
8	Методы силового поля	Методы прогнозирования свойств молекул.	Методы прогнозирования свойств молекул. Методы силового поля, корреляционные уравнения, молекулярные дискрипторы. Применение теории графов для описания структуры молекул: матрица связности, матрица расстояний, индексы Винера, Балабана и др. Метод молекулярного докинга, программы и сервисы, реализующие молекулярный докинг: AutoDock, Dicovery Studio.	2
			Итого за семестр:	**16**
			Итого:	**16**

4.2 Содержание лабораторных занятий

№ занятия	**Наименование раздела**	**Тема лабораторного занятия**	**Содержание лабораторного занятия** (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов)	**Количество часов / часов в электронной форме**
6 семестр				
1	Квантово-химические расчёты	Изображение молекулярных структур в химическом редакторе ChemSketch.	Рисование структур, их трёхмерная оптимизация, построение начальной геометрии для оптимизации геометрических параметров квантово-химическими методами. Картезианские (декартовы) координаты и внутренние координаты, Z-матрица.	2
2	Квантово-химические расчёты	Изображение молекулярных структур в химическом редакторе ChemSketch (продолжение)	Рисование структур, их трёхмерная оптимизация, построение начальной геометрии для оптимизации геометрических параметров квантово-химическими методами. Картезианские (декартовы) координаты и внутренние координаты, Z-матрица.	2
3	Квантово-химические расчёты	Программа визуализации квантово-химических расчетов Mac-MolPLT.	Рисование структур, их оптимизация путем редактирования Z-матрицы. Изменение нумерации атомов, "замораживание" отдельных координат для поиска переходных состояний. Создание исходного файла для про-граммы GAMESS. Алгоритм квантово-химического расчёта на примере молекулы метана.	2

4	Квантово-химические расчёты	Программа визуализации квантово-химических расчетов Mac-MolPLT (продолжение)	Рисование структур, их оптимизация путем редактирования Z-матрицы. Изменение нумерации атомов, "замораживание" отдельных координат для поиска переходных состояний. Создание исходного файла для про-граммы GAMESS. Алгоритм квантово-химического расчёта на примере молекулы метана.	2
5	Квантово-химические расчёты	Анализ результатов квантово-химических расчётов	Анализ результатов квантово-химических расчётов, построение графика изменения энергии в процессе расчета, визуализация молекулярных орбиталей, пересчет канонических орбиталей в локализованные.	2
6	Квантово-химические расчёты	Анализ результатов квантово-химических расчётов (продолжение)	Анализ результатов квантово-химических расчётов, построение графика изменения энергии в процессе расчета, визуализация молекулярных орбиталей, пересчет канонических орбиталей в локализованные.	2
7	Квантово-химические расчёты	Создание молекулярных слайдов и видеороликов	Создание слайдов и видеороликов, иллюстрирующих превращение одной структуры в другую	2
8	Квантово-химические расчёты	Создание молекулярных слайдов и видеороликов (продолжение)	Создание слайдов и видеороликов, иллюстрирующих превращение одной структуры в другую	2
9	Квантово-химические расчёты	Расчёт колебательного спектра простых молекул	Расчёт геометрии, электронной структуры, термохимии и колебательного спектра простых молекул с помощью программы GAMESS.	2
10	Квантово-химические расчёты	Расчёт колебательного спектра простых молекул (продолжение)	Расчёт геометрии, электронной структуры, термохимии и колебательного спектра простых молекул с помощью программы GAMESS.	2
11	Квантово-химические расчёты	Расчёт конформационного равновесия	Расчёт конформационного состава простых молекул с помощью программы GAMESS.	2
12	Квантово-химические расчёты	Расчёт конформационного равновесия (продолжение)	Расчёт конформационного состава простых молекул с помощью программы GAMESS.	2
13	Квантово-химические расчёты	Расчёт переходных состояний простых реакций	Расчёт переходных состояний простых реакций и их энергии активации с помощью программы GAMESS.	2
14	Квантово-химические расчёты	Расчёт переходных состояний простых реакций (продолжение)	Расчёт переходных состояний простых реакций и их энергии активации с помощью программы GAMESS.	2
15	Методы силового поля	Оптимизация геометрии молекул методом молекулярной механики	Расчёт геометрии молекул методом молекулярной механики с помощью программы Avogadro. Анализ конформационного состава алканов и их простейших функциональных производных.	2

16	Методы силового поля	Оптимизация геометрии молекул методом молекулярной механики (продолжение)	Расчёт геометрии молекул методом молекулярной механики с помощью программы Avogadro. Анализ конформационного состава алканов и их простейших функциональных производных.	2
			Итого за семестр:	**32**
			Итого:	**32**

4.3 Содержание практических занятий

Учебные занятия не реализуются.

4.4. Содержание самостоятельной работы

Наименование раздела	**Вид самостоятельной работы**	**Содержание самостоятельной работы** (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов)	**Количество часов**
6 семестр			
Квантово-химические расчёты	Подготовка к лабораторным занятиям.	Рисование структур, их трёхмерная оптимизация, построение начальной геометрии для оптимизации геометрических пара-метров квантово-химическими методами. Картезианские (декартовы) координаты и внутренние координаты, Z-матрица. Анализ результатов квантово-химических рас-чётов, построение графика изменения энергии в процессе расчета, визуализация молекулярных орбиталей, пересчет канонических орбиталей в локализованные. Создание слайдов и видеороликов, иллюстрирующих превращение одной структуры в другую.	33
Методы силового поля	Подготовка к лабораторным занятиям.	Расчёт геометрии молекул методом молекулярной механики с помощью программы Avogadro. Анализ конформационного состава алканов	10
		Итого за семестр:	**43**
		Итого:	**43**

5. Перечень учебной литературы и учебно-методического обеспечения по дисциплине (модулю)

№ п/п	**Библиографическое описание**	**Ресурс НТБ СамГТУ** (ЭБС СамГТУ, IPRbooks и т.д.)
Основная литература		

1	Степанов, Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. / Н. Ф. Степанов.- М., Мир, 2019Изд-во Моск. ун-та.- 519 с.	Книжный фонд
Дополнительная литература		
2	Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие / В. Г. Цирельсон .- 3-е изд..- М., БИНОМ.Лаб.знаний, 2014.- 495 с.	Книжный фонд
3	Ширяев, А.К. Квантовая химия : учебное пособие / А. К. Ширяев; Самарский государственный технический университет, Органическая химия .- 3-е изд., испр. и доп..- Самара, 2021.- 132 с..- Режим доступа: https://elib.samgtu.ru/getinfo?uid=els_samgtu||elib||5474	Электронный ресурс

Доступ обучающихся к ЭР НТБ СамГТУ (elib.samgtu.ru) осуществляется посредством электронной информационной образовательной среды университета и сайта НТБ СамГТУ по логину и паролю.

6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения

При проведении лекционных занятий используется мультимедийное оборудование.

Организовано взаимодействие обучающегося и преподавателя с использованием электронной ин-формационной образовательной среды университета.

№ п/п	Наименование	Производитель	Способ распространения
1	ChemSketch	acd/labs (Зарубежный)	Свободно распространяемое
2	GAMESS	Gordon's group, University of Iowa (Зарубежный)	Свободно распространяемое
3	MacMolPLT	Brett Bode (Зарубежный)	Свободно распространяемое
4	Avogadro	Avogadro Chemistry (Зарубежный)	Свободно распространяемое

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», профессиональных баз данных, информационно-справочных систем

№ п/п	Наименование	Краткое описание	Режим доступа
1	Журналы Американского химического общества Web Edition	http://www.acs.org/content/acs/en.html	Зарубежные базы данных ограниченного доступа
2	eLIBRARY.ru	http://www.eLIBRARY.ru/	Российские базы данных ограниченного доступа
3	Поисковая система SciVerse	http://www.scopus.com	Ресурсы открытого доступа

8. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Лекционные занятия

Аудитории для лекционных занятий укомплектованы мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории (наборы демонстрационного оборудования (проектор, экран, компьютер/ноутбук), учебно-наглядные пособия, тематические иллюстрации).

Лабораторные занятия

Компьютерный класс, укомплектованный современными компьютерами с установленным на них программным обеспечением для выполнения квантово-химических и молекулярно-механических расчётов молекул.

Самостоятельная работа

Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интеренет» и доступом к электронной информационно-образовательной среде СамГТУ:

- читальный зал НТБ СамГТУ (ауд. 200 корпус № 8; ауд. 125 корпус № 1; ауд. 41, 31, 34, 35 Главный корпус библиотеки, ауд. 83а, 414, 416, 0209 АСА СамГТУ; ауд. 401 корпус №10);
- компьютерные классы (ауд. 208, 210 корпус № 8).

9. Методические материалы

Методические рекомендации при работе на лекции

До лекции студент должен просмотреть учебно-методическую и научную литературу по теме лекции с тем, чтобы иметь представление о проблемах, которые будут разбираться в лекции.

Перед началом лекции обучающимся сообщается тема лекции, план, вопросы, подлежащие рассмотрению, доводятся основные литературные источники. Весь учебный материал, сообщаемый преподавателем, должен не просто прослушиваться. Он должен быть активно воспринят, т.е. услышан, осмыслен, понят, зафиксирован на бумаге и закреплен в памяти. Приступая к слушанию нового учебного материала, полезно мысленно установить его связь с ранее изученным. Следя за техникой чтения лекции (акцент на существенном, повышение тона, изменение ритма, пауза и т.п.), необходимо вслед за преподавателем уметь выделять основные категории, законы и определять их содержание, проблемы, предполагать их возможные решения, доказательства и выводы. Осуществляя такую работу, можно значительно облегчить себе понимание учебного материала, его конспектирование и дальнейшее изучение.

Конспектирование лекции позволяет обработать, систематизировать и лучше сохранить полученную информацию с тем, чтобы в будущем можно было восстановить в памяти основные, содержательные моменты. Типичная ошибка, совершаемая обучающимся, дословное конспектирование речи преподавателя. Как правило, при записи «слово в слово» не остается времени на обдумывание, анализ и синтез информации. Отбирая нужную информацию, главные мысли, проблемы, решения и выводы, необходимо сокращать текст, строить его таким образом, чтобы потом можно было легко в нем разобраться. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых можно будет делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. С окончанием лекции работа над конспектом не может считаться завершенной. Нужно еще восстановить отдельные места, проверить, все ли понятно, уточнить что-то на консультации и т.п. с тем, чтобы конспект мог быть использован в процессе подготовки к практическим занятиям, зачету, экзамену. Конспект лекции – незаменимый учебный документ, необходимый для самостоятельной работы.

Методические рекомендации при работе на лабораторном занятии

Проведение лабораторной работы делится на две условные части: теоретическую и практическую.

Необходимыми структурными элементами занятия являются проведение лабораторной работы, проверка усвоенного материала, включающая обсуждение теоретических основ выполняемой работы.

Перед лабораторной работой, как правило, проводится технико-теоретический инструктаж по использованию необходимого оборудования. Преподаватель корректирует деятельность обучающегося в процессе выполнения работы (при необходимости). После завершения лабораторной работы подводятся итоги, обсуждаются результаты деятельности.

Возможны следующие формы организации лабораторных работ: фронтальная, групповая и индивидуальная. При фронтальной форме выполняется одна и та же работа (при этом возможны различные варианты заданий). При групповой форме работа выполняется группой (командой). При индивидуальной форме обучающимися выполняются индивидуальные работы.

По каждой лабораторной работе имеются методические указания по их выполнению, включающие необходимый теоретический и практический материал, содержащие элементы и последовательную инструкцию по проведению выбранной работы, индивидуальные варианты заданий, требования и форму отчётности по данной работе.

Методические рекомендации по выполнению самостоятельной работы

Организация самостоятельной работы обучающихся ориентируется на активные методы овладения знаниями, развитие творческих способностей, переход от поточного к индивидуализированному обучению с учетом потребностей и возможностей обучающегося.

Самостоятельная работа с учебниками, учебными пособиями, научной, справочной литературой, материалами периодических изданий и Интернета является наиболее эффективным методом получения дополнительных знаний, позволяет значительно активизировать процесс овладения информацией, способствует более глубокому усвоению изучаемого материала. Все новые понятия по изучаемой теме необходимо выучить наизусть и внести в глоссарий, который целесообразно вести с самого начала изучения курса.

Самостоятельная работа реализуется:

- непосредственно в процессе аудиторных занятий;
- на лекциях, практических занятиях;
- в контакте с преподавателем вне рамок расписания;
- на консультациях по учебным вопросам, в ходе творческих контактов, при ликвидации задолженностей, при выполнении индивидуальных заданий и т.д.;
- в библиотеке, дома, на кафедре при выполнении обучающимся учебных и практических задач.

Эффективным средством осуществления обучающимся самостоятельной работы является электронная информационно-образовательная среда университета, которая обеспечивает доступ к учебным планам, рабочим программам дисциплин (модулей), практик, к изданиям электронных библиотечных систем.

10. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств представлен в приложении № 1.

Приложение 1 к рабочей программе дисциплины
Б1.В.01.02 «Вычислительные методы в химии»

Фонд оценочных средств
по дисциплине
Б1.В.01.02 «Вычислительные методы в химии»

Код и направление подготовки (специальность)	04.03.01 Химия
Направленность (профиль)	Органическая и биоорганическая химия
Квалификация	Бакалавр
Форма обучения	Очная
Год начала подготовки	2025
Институт / факультет	Химико-технологический факультет
Выпускающая кафедра	кафедра "Органическая химия"
Кафедра-разработчик	кафедра "Органическая химия"
Объем дисциплины, ч. / з.е.	144 / 4
Форма контроля (промежуточная аттестация)	Экзамен

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть, соотнесенные с индикаторами достижения компетенции)
Профессиональные компетенции			
Не предусмотрено	ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.2 Использует специализированное программное обеспечение и базы данных для получения и первичной обработки экспериментальных данных	Владеть навыками поиска информации по заданной тематике
			Знать теоретические основы традиционных и новых разделов химии и способы их использования при осуществлении научно-исследовательские работы
			Уметь применять знания общих и специфических закономерностей различных областей химической науки при осуществлении научно-исследовательские ра-боты
	ПК-3 Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-3.2 Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов	Владеть навыками использования теоретических основ базовых химических дисциплин для установления структуры органических соединений
			Знать современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений
			Уметь проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации

	ПК-7 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-конструкторские работы и технологические испытания	ПК-7.1 Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных)	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных).
			Знать основные методы информационной поддержки специалистов, осуществляющих научно-конструкторские работы и технологические испытания
			Уметь составлять обзор литературных источников по заданной теме, оформляет отчеты о выполненной работе по заданной форме
Универсальные компетенции			
Системное и критическое мышление	УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.2 Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов	Владеть приемами анализа и синтеза информации при выполнении профессиональной деятельности.
			Знать содержание процессов критического анализа и синтеза информации, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности
			Уметь планировать цели и устанавливать приоритеты при анализе и синтезе информации, применять системный подход для решения поставленных задач.
		УК-1.3 Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи	Владеть приемами анализа и синтеза информации при выполнении профессиональной деятельности.
			Знать содержание процессов критического анализа и синтеза информации, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности

			Уметь планировать цели и устанавливать приоритеты при анализе и синтезе информации, применять системный подход для решения поставленных задач.

Матрица соответствия оценочных средств запланированным результатам обучения

Код индикатора достижения компетенции	Результаты обучения	Оценочные средства	Текущий контроль успеваемости	Промежуточная аттестация
Квантово-химические расчёты				
ПК-2.2 Использует специализированное программное обеспечение и базы данных для получения и первичной обработки экспериментальных данных	**Знать** теоретические основы традиционных и новых разделов химии и способы их использования при осуществлении научно-исследовательские работы	Устный опрос	Нет	Да
	Владеть навыками поиска информации по заданной тематике	Устный опрос	Да	Нет
	Уметь применять знания общих и специфических закономерностей различных областей химической науки при осуществлении научно-исследовательские ра-боты	Устный опрос	Да	Нет
ПК-3.2 Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов	**Знать** современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений	Устный опрос	Нет	Да
	Владеть навыками использования теоретических основ базовых химических дисциплин для установления структуры органических соединений	Устный опрос	Да	Нет
	Уметь проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	Устный опрос	Да	Нет
ПК-7.1 Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных)	**Уметь** составлять обзор литературных источников по заданной теме, оформляет от-четы о выполненной работе по заданной форме	Устный опрос	Да	Нет
	Знать основные методы информационной поддержки специалистов, осуществляющих научно-конструкторские работы и технологические испытания	Устный опрос	Нет	Да
	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных).	Устный опрос	Да	Нет

УК-1.2 Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов	**Владеть** приемами анализа и синтеза информации при выполнении профессиональной деятельности.	Устный опрос	Да	Нет
	Знать содержание процессов критического анализа и синтеза информации, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности	Устный опрос	Нет	Да
	Уметь планировать цели и устанавливать приоритеты при анализе и синтезе информации, применять системный подход для решения поставленных задач.	Устный опрос	Да	Нет
УК-1.3 Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи		Устный опрос	Да	Нет
	Знать содержание процессов критического анализа и синтеза информации, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности	Устный опрос	Нет	Да
	Владеть приемами анализа и синтеза информации при выполнении профессиональной деятельности.	Устный опрос	Да	Нет
Методы силового поля				
ПК-2.2 Использует специализированное программное обеспечение и базы данных для получения и первичной обработки экспериментальных данных	**Уметь** применять знания общих и специфических закономерностей различных областей химической науки при осуществлении научно-исследовательские ра-боты	Устный опрос	Да	Нет
	Знать теоретические основы традиционных и новых разделов химии и способы их использования при осуществлении научно-исследовательские работы	Устный опрос	Нет	Да
	Владеть навыками поиска информации по заданной тематике	Устный опрос	Да	Нет
ПК-3.2 Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов	**Владеть** навыками использования теоретических основ базовых химических дисциплин для установления структуры органических соединений	Устный опрос	Да	Нет
	Знать современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений	Устный опрос	Нет	Да
	Уметь проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	Устный опрос	Да	Нет

ПК-7.1 Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных)	**Знать** основные методы информационной поддержки специалистов, осуществляющих научно-конструкторские работы и технологические испытания	Устный опрос	Нет	Да
	Уметь составлять обзор литературных источников по заданной теме, оформляет отчеты о выполненной работе по заданной форме	Устный опрос	Да	Нет
	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных).	Устный опрос	Да	Нет
УК-1.2 Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов	**Знать** содержание процессов критического анализа и синтеза информации, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности	Устный опрос	Нет	Да
	Уметь планировать цели и устанавливать приоритеты при анализе и синтезе информации, применять системный подход для решения поставленных задач.	Устный опрос	Да	Нет
	Владеть приемами анализа и синтеза информации при выполнении профессиональной деятельности.	Устный опрос	Да	Нет
УК-1.3 Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи		Устный опрос	Да	Нет
	Уметь планировать цели и устанавливать приоритеты при анализе и синтезе информации, применять системный подход для решения поставленных задач.	Устный опрос	Да	Нет
	Знать содержание процессов критического анализа и синтеза информации, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности	Устный опрос	Нет	Да

Примерные задания для самостоятельной работы.

1. Изображение стереоизомеров и конформеров соединения предложенной структуры. Построение Z-матрицы соединений, предложенных преподавателем (пропан, циклопентан, ацетон, уксусная кислота, глицин и др.).
2. Изображение схемы механизма реакции: бимолекулярное нуклеофильное замещение, элиминирование, мономолекулярное нуклеофильное замещение, электрофильное замещение в ароматическом ряду, электрофильное присоединение, присоединение-отщепление по карбонильной группе и др.
3. Расчёт геометрии и электронной структуры простых молекул с помощью программы GAMESS.
4. Расчет энергии активации простых реакций с помощью программы GAMESS.
   Расчёт геометрии молекул методом молекулярной механики с помощью программы Avogadro.

Шкала и процедура оценивания сформированности компетенций

На этапе текущей аттестации по результатам тестирования и сдачи отчетов по лабораторным работам оценивается уровень достижения каждого из запланированных результатов обучения – дескрипторов (знаний, умений, владений) в соответствии со шкалами и критериями, установленными картами компетенций ОПОП (Приложение 1 ОПОП). При достижении уровня сформированности заявленных дескрипторов компетенций более 75% студент получает допуск к экзамену.

На этапе промежуточной аттестации используется система оценки успеваемости обучающихся, которая позволяет преподавателю оценить уровень освоения материала обучающимися. Критерии оценивания сформированности планируемых результатов обучения (дескрипторов) представлены в карте компетенции ОПОП.

Форма оценки знаний: для зачета – «зачет/незачет»; для экзамена: оценка - 5 «отлично»; 4 «хорошо»; 3 «удовлетворительно»; 2 «неудовлетворительно». Лабораторные работы оцениваются по системе «зачет/незачет», задания для практических занятий - «зачет/незачет».

Шкала оценивания:

«Зачет» – выставляется, если сформированность заявленных дескрипторов компетенций более 75%, при этом обучающийся показывает хорошие знания изученного учебного материала; самостоятельно, логично и последовательно излагает и интерпретирует материалы учебного курса; полностью раскрывает смысл предлагаемого вопроса; владеет основными терминами и понятиями изученного курса; показывает умение переложить теоретические знания на предполагаемый практический опыт.

«Отлично» – выставляется, если сформированность заявленных дескрипторов компетенций 80% и более (в соответствии с картами компетенций ОПОП) оценивается критериями «хорошо» и «отлично», при условии отсутствия оценки «неудовлетворительно»: студент показал прочные знания основных положений фактического материала, умение самостоятельно решать конкретные практические задачи повышенной сложности, свободно использовать справочную литературу, делать обоснованные выводы из результатов анализа конкретных ситуаций;

«Хорошо» – выставляется, если сформированность заявленных дескрипторов компетенций на 60% и более (в соответствии с картами компетенций ОПОП) оценивается критериями «хорошо» и «отлично», при условии отсутствия оценки «неудовлетворительно», допускается оценка «удовлетворительно»: обучающийся показал прочные знания основных положений фактического материала, умение самостоятельно решать конкретные практические задачи, предусмотренные рабочей программой, ориентироваться в рекомендованной справочной литературе, умеет правильно оценить полученные результаты анализа конкретных ситуаций;

«Удовлетворительно» – выставляется, если сформированность заявленных дескрипторов компетенций 40% и более (в соответствии с картами компетенций ОПОП) оценивается критериями «удовлетворительно», «хорошо» и «отлично»: обучающийся показал знание основных положений фактического материала, умение получить с помощью преподавателя правильное решение конкретной практической задачи из числа предусмотренных рабочей программой, знакомство с рекомендованной справочной литературой;

«Неудовлетворительно» – выставляется, если сформированность заявленных дескрипторов компетенций менее чем 40% (в соответствии с картами компетенций ОПОП) оценивается критериями «удовлетворительно», «хорошо» и «отлично»: при ответе обучающегося выявились существенные пробелы в знаниях основных положений фактического материала, неумение с помощью преподавателя получить правильное решение конкретной практической задачи из числа предусмотренных рабочей программой учебной дисциплины.

Соответствие критериев оценивания сформированности планируемых результатов обучения (дескрипторов) системам оценок представлено в табл. 4

Таблица 4

Интегральная оценка

Критерии	Традиционная оценка	Балльно-рейтинговая оценка
5	5	86 - 100
4	4	61-85
3	3	51-60
2 и 1	2	0-50

Обучающиеся обязаны сдавать все задания в сроки, установленные преподавателем. Оценка «Удовлетворительно» по дисциплине может выставляться и при неполной сформированности компетенций в ходе освоения отдельной учебной дисциплины, если их формирование предполагается продолжить на более поздних этапах обучения, в ходе изучения других учебных дисциплин.

Направление подготовки: **04.03.01 Химия**
(шифр и наименование направления подготовки/специальности)

Профиль: Органическая и биоорганическая химия
(наименования профиля)

Дисциплина **«Вычислительные методы в химии»**
(шифр и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом)

Номер задания	Содержание задания	Ключ к ответу	Тема РПД	Семестр
ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы				
1	Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ. Укажите, что такое молекулярная орбиталь: 1. Область пространства, в которой находится электрон в молекуле. 2. Волновая функция одного электрона или двух электронов с разными спинами. 3. Молекулярная волновая функция. 4. Волновая функция, описывающая химическую связь.	2. Волновая функция одного электрона или двух электронов с разными спинами.	Квантово-химические расчёты	6
2	Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ. Укажите, что такое молекулярная орбиталь: 1. Область пространства, в которой находится электрон в молекуле. 2. Молекулярная волновая функция. 3. Волновая функция одного электрона или двух электронов с разными спинами. 4. Волновая функция, описывающая химическую связь.	3. Волновая функция одного электрона или двух электронов с разными спинами.	Квантово-химические расчёты	6
ПК-3 Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации				
1	Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ. Укажите, что такое самосогласованное поле: 1. Усреднённое поле всех электронов. 2. Усреднённое поле всех электронов, кроме одного. 3. Метод решения уравнений Хартри-Фока в базисе атомных орбиталей. 4. Метод решения уравнений Хартри-Фока в базисе молекулярных орбиталей.	3. Метод решения уравнений Хартри-Фока в базисе атомных орбиталей.	Квантово-химические расчёты	6
2	Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ. Укажите, что такое самосогласованное поле: 1. Метод решения уравнений Хартри-Фока в базисе атомных орбиталей. 2. Усреднённое поле всех электронов, кроме одного. 3. Усреднённое поле всех электронов. 4. Метод решения уравнений Хартри-Фока в базисе молекулярных орбиталей.	1. Метод решения уравнений Хартри-Фока в базисе атомных орбиталей.	Квантово-химические расчёты	6
ПК-7 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-конструкторские работы и технологические испытания				

1	Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ. Укажите, какие свойства молекулы можно рассчитать методом молекулярной механики: 1. Оптимальная геометрия. 2. Электронная структура. 3. УФ спектр. 4. Дипольный момент.	1. Оптимальная геометрия.	Методы силового поля	6
2	Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ. Укажите, какие свойства молекулы можно рассчитать методом молекулярной механики: 1. Дипольный момент. 2. Электронная структура. 3. УФ спектр. 4. Оптимальная геометрия.	4. Оптимальная геометрия.	Методы силового поля	6
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач				
1	Прочитайте текст вопроса и дайте развернутый ответ. Укажите критерий оптимизации геометрии: 1. Величина орбитального градиента меньше 0.0001. 2. Величина максимального градиента энергии меньше 0.0001. 3. Величина минимального градиента энергии меньше 0.0001. 4. Величина среднеквадратичного градиента энергии меньше 0.0001.	2.Величина максимального градиента энергии меньше 0.0001.	Методы силового поля	6
2	Прочитайте текст вопроса и дайте развернутый ответ. Укажите критерий оптимизации геометрии: 1. Величина максимального градиента энергии меньше 0.0001. 2. Величина орбитального градиента меньше 0.0001. 3. Величина минимального градиента энергии меньше 0.0001. 4. Величина среднеквадратичного градиента энергии меньше 0.0001.	1.Величина максимального градиента энергии меньше 0.0001.	Методы силового поля	6