

Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» является частью математического и естественнонаучного цикла дисциплин подготовки бакалавров по направлению подготовки 020100 «Химия» по профилю «Органическая и биорганическая химия». Дисциплина реализуется на химико-технологическом факультете ФГБОУ ВПО «Самарский государственный технический университет» кафедрой органической химии.

Целью освоения дисциплины "Вычислительные методы в химии" является обеспечение необходимого объёма фундаментальных теоретических знаний об информационных технологиях и их применении в химических исследованиях для формирования научного мировоззрения в системе дисциплин химического образования. В результате освоения дисциплины студенты должны:

- уметь использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ОК-6);
- владеть основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, иметь навыки работы с компьютером как средством управления информацией (ОК-9);
- владеть основами теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, органической, аналитической, физической, химии высокомолекулярных соединений, биологических объектов, химической технологии) (ПК-2);
- быть способен применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных (ПК-3).

Задачи изучения дисциплины: усвоение студентом основных вычислительных методов химии, приобретении навыков работы с химической вычислительными программами, овладение методологией проведения расчётов.

Дисциплина нацелена на формирование общекультурных компетенций ОК-6, ОК-9, профессиональных компетенций ПК-2, ПК-3 выпускника.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с изучением методов исследования с применением вычислительных технологий в химии и приобретения навыков практической деятельности, изучение расчётных программ, их применения для расчёта свойств молекул.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, лабораторные работы, самостоятельная работа студента.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля: текущий и рубежный контроль успеваемости в форме проверки расчётно-графических домашних заданий и отчётов по лабораторным работам и промежуточный контроль в форме экзамена.

Общая трудоемкость освоения дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 часов. Программой дисциплины предусмотрены лекционные (18 часов), лабораторные занятия (36 часов) и 27 часов самостоятельной работы студента.