

### Аннотация рабочей программы

Дисциплина "Вычислительные методы в химии" относится к циклу математических и естественнонаучных дисциплин подготовки специалистов по направлению 020201 «Фундаментальная и прикладная химия», специализация 020201.03 «Органическая химия» и 020201.19 «Фармацевтическая химия». Дисциплина реализуется на химико-технологическом факультете ФГБОУ ВПО «Самарский государственный технический университет» кафедрой органической химии.

Цели и задачи дисциплины. Целью освоения дисциплины является обеспечение необходимого объёма фундаментальных теоретических знаний о применении вычислительных методов в химических исследованиях для формирования научного мировоззрения в системе дисциплин химического образования. В результате освоения дисциплины студенты должны:

- быть способны логически верно, аргументировано и ясно строить устную и письменную речь, владеть развитой письменной и устной коммуникацией (ОК-6);
- уметь работать с компьютером на уровне пользователя, применять навыки работы с компьютером как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности (ОК-8);
- владеть основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, иметь навыки работы с компьютером как средством управления информацией (ОК-10);
- уметь использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ПК-4);
- владеть основами теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, органической, аналитической, физической, химии высокомолекулярных соединений, биологических объектов, химической технологии) (ПК-11);
- уметь применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных (ПК-12).

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-8, ОК-10, профессиональных компетенций ПК-4, ПК-11 и ПК-12 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 трудоёмкость освоения дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 часов. Программой дисциплины предусмотрены лекционные (18 часов), лабораторные занятия (36 часов) и 27 часов самостоятельной работы студента.