

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова
Факультет биологии и экологии

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по развитию образования
_____ Е.В.Сапир

" ____ " _____ 2012 г.

**Рабочая программа дисциплины
послевузовского профессионального образования
(аспирантура)
Компьютерная химия
по специальности научных работников
02.00.03 Органическая химия**

Ярославль 2012

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 образовательной программы послевузовского профессионального образования

Данная дисциплина относится к разделу обязательные дисциплины (подраздел дисциплины по выбору аспиранта ОД.А.05) образовательной составляющей образовательной программы послевузовского профессионального образования по специальности научных работников 02.00.03 органическая химия.

Дисциплина «Компьютерная химия» показывает пути оптимизации химического эксперимента, сбора и обработки химической информации, обработки и интерпретации результатов эксперимента.

Для изучения данной дисциплины необходимы «входные» знания, умения, полученные в процессе обучения по программам специалитета или бакалавриата – магистратуры, а также при изучении дисциплины «Современная органическая химия») в аспирантуре и готовность обучающегося, к восприятию знаний и навыков, необходимых при освоении данной дисциплины и приобретенных в результате освоения предшествующих дисциплин. Освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее для выполнения и защиты диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук.

3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины «Компьютерная химия»

В результате освоения дисциплины «Компьютерная химия» обучающийся 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. Структура и содержание дисциплины «Компьютерная химия»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

№ п/п	Раздел Дисциплины	Курс	Неделя	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, и трудоемкость (в часах) Форма обуч.: очная/заочная					Формы текущего контроля успеваемости (по неделям) Форма промежуточной аттестации
				Лекций	Лабораторных	Практических	Сам. работа	Контроль сам. работы	
1	Тема 1. Предмет компьютерной химии	1	1	1/1			17/17		Реферат
2	Тема 2. Химические редакторы и базы данных	1	2	1/0			17/18		Задание в рамках самостоятельной работы
3	Тема 3. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	1	3	1/1			17/17		Задание в рамках самостоятельной работы
4	Тема 4. Формально-логические подходы к конструированию органических молекул и поиску новых органических реакций	1	4	1/1			17/17		Задание в рамках самостоятельной работы
5	Тема 5. Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры.	1	5	1/0			17/18		Задание в рамках самостоятельной работы
6	Тема 6. Компьютерные технологии в обмене научной информацией	1	6	1/1			17/17		Задание в рамках самостоятельной работы
		1		6/4			102/104		Зачет

Содержание 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 преподавании используются мультимедийные презентации, иллюстрации, таблицы, методические пособия.

В преподавании курса используются активные и интерактивные технологии проведения занятий в сочетании с внеаудиторной работой.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

В качестве средств текущего контроля используется 1 реферат, а также выполняемые в рамках самостоятельной работы задания. Промежуточная аттестация (зачет) дает возможность выявить уровень профессиональной подготовки аспиранта по данной дисциплине.

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

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.

Вопросы к аттестации (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.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература: (не более двух наименований – желательно наличие в библиотеке)
Орлов В.Ю., Русаков А.И., Тихонов С.В. Компьютерные технологии в образовательной и научной деятельности. – Ярославль, : ЯрГУ, 2005. - 124 с.

б) дополнительная литература:

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Журналы научной электронной библиотеки (elibrary.ru)
2. Журналы американского химического общества (<http://pubs.acs.org>)
3. Доступ к патентным базам данных компании Questel (<http://www.qpat.com/>)
4. Organic Chemistry Portal (<http://www.organic-chemistry.org/>)
5. Журналы Wiley-VCH (<http://www.wiley-vch.de/publish/en/journals/alphabeticalIndex/?sID=g2l06r5eqi7q28ioctnuhhimo1>)

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вычислительный кластер T-Blade (HPC 0012800-001)

Программное обеспечение: пакеты квантовохимических программ

Компьютерный класс – 7 рабочих мест.

Программа составлена в соответствии с федеральными государственными требованиями к структуре основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (приказ Минобрнауки от 16.03.2011 г. № 1365) с учетом рекомендаций, изложенных в письме Минобрнауки от 22.06.2011 г. № ИБ – 733/12.

Программа одобрена на заседании кафедры органической и биологической химии

17.10.2012 г. (протокол № 5)

Заведующий кафедрой

Орлов В.Ю., д.х.н., проф.

Автор

Орлов В.Ю., д.х.н., проф.