

МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ, НАУКИ И
ИННОВАЦИЙ РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН

НУКУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ ИМЕНИ АЖИНИЯЗА

Проректор по учебной работе в.и.д.

А.Абдиев



СИЛЛАБУС ПО ДИСЦИПЛИНЕ
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ХИМИИ

Дневное обучение
3-курс

Область знания:	100000 – гуманитарная сфера
Область образования:	110000 – педагогика
Направление бакалавриата:	60110800 - химия

Нукус-2024

**Модуль/предметная программа
Факультет естественных наук
60110800 — Химия**

Предмет / модуль:	Компьютерное моделирование в химии
Предмет /тип модуля:	Выбор предмет
Предмет /код модуля:	ХКМ304
Год:	2024-2025
Семестр:	V
Форма обучения:	Дневное
Форма занятий и часы, отведенные на семестр:	120
Лекция	30
Практическая занятия	30
Самостоятельные образование	60
Кредитные количество:	4
Форма оценки:	Тест и экзамен
Язык курса:	рус

1. Цель предмета/модуля (ММ)

F/ММ1	<p>Этот учебный план подготовлен на основе учебного плана «Компьютерное моделирование в химии» в учебной программе 60110800 - Химия.</p> <p>Цель предмета - применение компьютерной техники как нового направления в химических исследованиях – изучение структуры и свойств органических соединений, содержащихся в нефти и нефтепродуктах, с помощью компьютерной химии или молекулярного моделирования, а также путей их скрининга и синтеза.</p> <p>Задачи предмета - состоит в том, чтобы сформировать представление об изучении химических задач о строении, свойствах химических соединений с математической точки зрения, ознакомиться с методами решения заданных задач с помощью компьютерных программ, методами моделирования структуры и свойств химических соединений с помощью специальных программ, подготовить модели к анализу с помощью компьютерного инструмента.</p>
--------------	--

2. Базовые знания, необходимые для овладения наукой

1	Она заключается в обучении студента теоретическим знаниям, практическим навыкам, методическому подходу к процессу творческого мышления и формирования научного мировоззрения,
----------	---

	познанию содержания и сущности законов и категорий, раскрытию роли и значения человека в жизни путем формирования Личное отношение к ним.
--	---

3. Образовательные результаты (ОР)	
ОР1	Знания и навыки, необходимые для реализации современных подходов и инноваций в обучении химии в школе
ОР2	Использование современных средств обучения на уроках химии в школе.
ОР3	Способы эффективной организации уроков химии в школе с учетом современных требований
ОР4	Основы инновационной деятельности в сфере образования
ОР5	Быть в курсе современных подходов и инновационных технологий, используемых при обучении химии и проведении научных исследований в школе
ОР6	Знание современных требований к преподаванию химии в школе
ОР7	Обеспечение целостности и последовательности содержания, средств, методов и форм химии в школе
ОР8	Эффективное использование образовательных ресурсов на занятиях
ОР9	Иметь навыки обработки, обобщения и передачи информации, связанной с содержанием обучения, студентам
ОР10	Применение современных инновационных педагогических технологий на уроках химии в школе
ОР11	Владение навыками организации уроков исходя из современных требований к урокам химии в школе
ОР12	Использование современных подходов и инноваций в профессиональной деятельности
ОР13	Быть в курсе достижений химии в школе, проводить исследования по ее применению в производстве в сфере образования
Содержание предмета/модуля	
1. Вид занятия: Лекция (Л)	
Л1	<p>Эмпирика и теория. Химические величины, которые можно рассчитать. Эмпирические (экспериментальные) методы, длины связей соединений, валентные и торсионные углы, потенциалы ионизации и склонность к электронам. Величины, определяемые несколькими эмпирически рассчитанными методами с использованием теоретических методов расчета. Сравнение расчетных величин соединений с величинами, полученными в эксперименте.</p> <p>Эмпирические неэмпирические методы расчета. Методы эмпирических и неэмпирических вычислений в составе химических компьютерных программ. Методы формирования начальных геометрий для вычислений.</p>

Л2	<p>Экспериментально-теоретические параметры, характеризующие электронную структуру соединений. Химическая длина и энергия связи. Потенциалы ионизации. Сродство к электронам. Теплота образования соединений.</p> <p>Графические приложения в химии. ISISDraw, ChemWin, ChemDraw. Отличие этих программ от вычислительных.</p>
Л3	<p>Эмпирические расчеты в программе Авогадро. Формирование 3D структур соединений в программе Авогадро. Оптимизация геометрии. Сущность параметризации эмпирических методов. Реалистичная и идеальная длина связи.</p> <p>Полуэмпирические методы расчета. Энергетические параметры. Распределение зарядов, отображение молекулярных структур методами квантовой химии, графическое представление электронных, спектральных и других описаний молекулярных систем.</p>
Л4	<p>Метод расчета ab-initio Ab – initio-химический метод расчета. Правила выбора базисных функций. Пакет современных программ интегрированных вычислений. Выбор подходящего стиля решения задачи.</p> <p>Вычислительный комплекс Hyperchem и его применение для решения химических задач вычисление ИК - и УФ-спектров. Расчет распределения зарядов и сравнение результатов с изменением силовых полей.</p>
Л5	<p>Применение программы Chemoffice для решения химических задач Построение 2D и 3D геометрии. Симуляция ЯМР-¹³C и ¹H спектров. Ознакомление с физико-химическими характеристиками.</p> <p>Физические исследования применяемые в вычислительные комплексы для анализа приложений, которые могут быть использованы для интерпретации УФ -, ИК -, масс - и ЯМР-спектров.</p>
Вид занятия: Практическая занятия(П)	
П1	Поиск соединений с хромофорами, и расчет УФ – спектра. Сравнение с УФ-спектром, полученным в эксперименте.
П2	Нарисовать соединения, содержащие карбонильные, гидроксидные и C=N-группы, и теоретически рассчитать их колебания в ИК-спектре.
П3	наименование следующих соединений в программе ChemOffice, ¹³ s- ¹³ C-ЯМР; расчет спектров PMR.
П4	Расчет физико-химических параметров соединений в программе ChemOffice и перевод двумерной структуры в трехмерное состояние.
П5	Нарисовать трехмерную структуру в программе ChemOffice. Сохранить в форматах, которые может читать Hyperchem, Avogadro и другие программы.

Самостоятельное обучение (СО)

Лекции и лабораторные занятия	
Подготовка и выполнение домашнего задания	10 часов
Ситуационные вопросы (кейс)	10 часов
Перевод данных источников	10 часов
По заданной теме химической технологии	10 часов
Презентаций и написания тезисов на основе	теоретических материалов
Об учебниках и учебных пособиях	
Научные главы и темы изучать	10 часов
По дополнительным материалам лекционный материал	10 часов
Темы самостоятельных работ	
Программы MM	
Меню программ MM	
Порядок работы в программе MM	
Анализ полученных результатов в программе MM	
Теория качества	
Метод Хюккеля	
Программы Морас	
Способы работы с программами Морас	
Меню программы Морас	
Методы присоединения результатов программ Морас с другими программами	
Программ GAUSSIAN	
Порядок работы в GAUSSIAN	
Меню GAUSSIAN	
Ошибки результатов в GAUSSIAN	
Расчет электронной структуры одно-гетероатомных соединений	
Расчет электронной структуры двух-гетероатомных соединений	
Расчет электронной структуры многогетероатомных соединений	
Работа с программами компьютерного моделирования в средах силовых полей	
Составление задания Ab-initio	
Молекулярная механика MM2	
QSAR анализ природных соединений	
Программа ArgusLab. Получение информации о строении, изучении и связывании комплексов белок-лиганд	
Работа со стандартным вспомогательным редактором и графическими программами (IsisDraw)	

Основная литература	
1	1. Эррол Г. Lewars. Компьютерная Химия. Введение в теорию и приложения молекулярной и квантовой механики. Springer Science-Business Media B.V. 2011. Pp. 687.
2	2. Ребекка С. Уэйд., Outi M. H. Salo-Ahen Molecular Modeling in Drug Design. Германия (HITS ggmbhgheidelsberg University) против Финляндии

	(Abo Akademi University). 2019. Стр. 222.
3	3. Маттиас Отто. Хемометрия. Статистика и компьютерное применение в аналитической химии. Third Edition. Wiley-VCH Verlag GmbH & So. КГА. 2017. Рр. 386.
4	4. Кристофер Дж. Крамера. Основы вычислительной химии. Теории и модели. Second Edition. John Wiley & Sons Ltd. 2014. Рр. 607.
5	5. Urokiporabs V hyperchem B formate Word SH. Химиясайта I MnogoeDrugoe (2007). URL: HTTP: Qqa-космонавт.народ.rugprogghyperchem.rar (Data obrahenia 13.10.2012).
6	6. Ишимбетов А.Г. Хайтбаев А. Хайтбаев Х. Маулянов С.А. Ташов Х.С. Компьютерная химия. Методическое пособие. Ташкент. Типография узгу. 2015. 115 С.
Дополнительная литература:	
1	7. Мирзиеев Ш.М. Вместе мы создадим свободное и процветающее демократическое государство Узбекистан. Ташкент, НМИЦ "Узбекистан", 2017. -29 С.
2	8. Мирзиеев Ш.М. Критический анализ, строгая дисциплина и личная ответственность должны быть ежедневным правилом деятельности каждого лидера. Выступление Президента Республики Узбекистан на заседании Кабинета Министров Республики Узбекистан, посвященном итогам 2016 года и перспективам на 2017 год. Газета "Народное слово". 16 января 2017 г., №11.
3	9. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Moleculo', „molecularnoesystemo ' и твердое тело: учебное пособие. -М.: Бином. Лаборатория знания 2010. 495 С.
4	10. Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем: учебное пособие. СПб., М., 2010. 384 с.
5	11. Кларк Т. Компьютерная химия: практическое руководство по расчетам структуры и энергии молекул G' Т. Кларк; Пер. с англ. А. А. Коркин. – М.: Мир, 1990. 381 С.
6	12. Ишимбетов А.Г. Хайтбаев А.Х. Маулянов С.А. Ташов Г.С. Действия по спектрам в программе "портативная Местренова". Методическое пособие. Типография узгу. 2019. 60 С.

Предлагается на основе критериев контроля успеваемости студента по предмету.

А) Для того, чтобы получить 5 оценок, студенту необходимо ответить на вопросы уровня знаний:

- полностью понять значение и содержание науки;
- при анализе предметов науки, сохраняя научность и логичность и не допуская научных ошибок;
- иметь четкое представление о теоретической и практической значимости изучаемого материала;
- уметь продемонстрировать способность свободно мыслить в области науки;
- может четко и кратко отвечать на вопросы;
- если синопсис тщательно подготовлен;
- если самостоятельно порученные задания выполнены полностью и точно;
- если законы и другие нормативные правовые документы, связанные с наукой, полностью нарушены;
- если он опубликовал научную статью на темы, связанные с наукой;
- способен объяснить исторические процессы;

В) Для того, чтобы получить 4 оценок, студенту необходимо ответить на вопросы уровня знаний:

- полностью понять значение и содержание науки;
- при анализе предметов науки, сохраняя научность и логичность и не допуская научных ошибок;
- иметь четкое представление о теоретической и практической значимости изучаемого материала;
- уметь продемонстрировать способность свободно мыслить в области науки;
- может четко и кратко отвечать на вопросы;
- если синопсис тщательно подготовлен;
- если самостоятельно порученные задания выполнены полностью и точно;
- если законы и другие нормативные правовые документы, связанные с наукой, полностью нарушены;

С) Для того, чтобы получить 3 оценок, студенту необходимо ответить на вопросы уровня знаний:

- полностью понять значение и содержание науки;
- при анализе предметов науки, сохраняя научность и логичность и не допуская научных ошибок;
- иметь четкое представление о теоретической и практической значимости изучаемого материала;
- уметь продемонстрировать способность свободно мыслить в области науки;
- может четко и кратко отвечать на вопросы;

Д) В следующих случаях уровень знаний обучающегося может быть оценен 2 неудовлетворительными оценками:

- если он не готовился к занятиям по естествознанию;
- не имеет никакого представления о научной подготовке;
- если замечено, что он скопировал упражнения по науке у других;
- в упражнениях по естествознанию допускаются ошибки и ошибки;

Автор программы:	Л. Аймурзаева– (PhD), в.и.д. доцент кафедры «Методика преподавания химии»
E-mail:	aumurzaevaliza591@gmail.com
Организация:	НГПИ им. Ажинияза, кафедра «Методика преподавания химии»
Оппоненты	Жумабаев Б.А. – доцент кафедры «Методика преподавания химии» Нукусский государственный педагогический институт имени Ажинияза, кандидат химических наук. Нуримбетов Б.Ч. - доцент кафедры «Физической и коллоидной химии», Каракалпакский государственный университет имени Бердаха, кандидат химических наук

Программа предмета подтверждена отчетом № 11 от 29.06 2024 года Нукусского государственного педагогического института имени Ажинияза.

Программа предмета «Методика преподавания химии» утверждена протоколом заседания № 11 от 25.06 2024 года.

Начальник учебно-методического управления

Декан факультета

Заведующий кафедры

Составитель

А. Абдиев

Қ. Реймов

Л. Кабулова

Л. Аймурзаева