

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Локтионова Оксана Геннадьевна
Должность: проректор по учебной работе
Дата подписания: 15.05.2017 00:43:19
Уникальный программный ключ:
0b817ca911e6668abb13a5d426d39e5f1c11eabbf75e943df4a4851fda56d089

МИНОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Юго-Западный государственный университет»
(ЮЗГУ)

Кафедра нанотехнологий и инженерной физики

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе
О.Г. Локтионова
« 25 » 12 2017 г.



КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ

Методические рекомендации для самостоятельной работы
студентов направления подготовки
28.03.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника»

УДК 62

Составители: А.В. Кузько

Рецензент

Доктор физико-математических наук, профессор *А.П. Кузьменко*

Компьютерная химия: методические рекомендации для самостоятельной работы студентов направления подготовки 28.03.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника» / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Кузько. – Курск, 2017. – 13 с.

Изложены основные требования к организации самостоятельной работы студентов. Перечислены виды и формы проведения самостоятельной работы и ее контроля, раскрыты особенности организационно-методического обеспечения. Представлены задания к самостоятельной работе по дисциплине «Компьютерная химия».

Материал предназначен для студентов направления подготовки 28.03.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника», а также будет полезен студентам всех других направлений подготовки, изучающих дисциплины нанотехнологического цикла.

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать 15.12.17. Формат 60 x 84 1/16.
Усл. печ. л. 0,76. Уч.- изд. л. 0,68. Тираж 50 экз. Заказ 3561.
Бесплатно.

Юго-Западный государственный университет.
305040, Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Самостоятельная работа студентов (СРС) - одна из форм индивидуальной работы студентов, важнейшая составная часть процесса подготовки будущих специалистов.

Целями СРС являются формирование у студентов навыков к самостоятельному творческому труду, умение решать профессиональные задачи с использованием всего арсенала современных средств, потребность к непрерывному самообразованию и совершенствованию своих знаний; приобретение опыта планирования и организации рабочего времени и расширение кругозора.

Самостоятельная работа студентов способствует активизации умственной деятельности и самостоятельному усвоению знаний, формированию профессиональных умений и навыков, обеспечивает формирование общекультурных, профессиональных компетенции будущего специалиста. Она максимально развивает познавательные и творческие способности личности в рамках актуализации компетентностного подхода.

Кроме того, СРС позволяет студенту развивать свои возможности, потребности, интересы посредством проектирования собственного индивидуального образовательного маршрута, побуждает к научно-исследовательской работе.

Самостоятельная работа студентов включает в себя два вида: аудиторную и внеаудиторную работу.

Самостоятельная аудиторная работа студентов (САРС) по дисциплине выполняется под непосредственным руководством и контролем преподавателя, по его заданию. САРС осуществляется в сроки, определяемые учебным планом и расписанием занятий.

Внеаудиторная самостоятельная работа выполняется студентами по заданию преподавателя, но без его непосредственного участия и не регламентируется расписанием занятий. Она может выполняться студентами с использованием дистанционных образовательных технологий в различных формах, главным принципом которых является удаленная СРС, где студент и преподаватель взаимодействуют (передают и получают задания, методические материалы, контрольные вопросы, тестовые задания и т. п. в электронном виде) посредством локальной и глобальной сетей.

Формами реализации такой работы могут быть различные способы ИТ-коммуникаций, выбираемые преподавателем с учетом особенностей преподавания дисциплины.

Объем времени на САРС включается в общий объем времени, отведенного на СРС, согласно учебному плану. При этом на САРС не переносятся лабораторные, практические, семинарские и другие занятия, предусмотренные расписанием.

Самостоятельная аудиторная работа студентов включает следующие формы работ:

- дополнительные занятия;
- текущие консультации по дисциплине;
- консультация и защита рефератов;
- консультация и прием индивидуальных домашних заданий;
- консультации по расчетно-графическим, курсовым работам (проектам) в рамках дисциплин;
- консультации по выпускным квалификационным работам;
- учебно-исследовательская работа.

Внеаудиторная СРС, в том числе с использованием дистанционных образовательных технологий, включает следующие формы работ:

- работа с учебниками, учебными и методическими пособиями (как на бумажных, так и на электронных носителях);
- работа с первоисточниками;
- работа с конспектами лекций, научными статьями;
- составление конспектов в виде электронного документа, презентаций на базе рекомендованной лектором учебной литературы, включая электронные учебные издания (электронные учебники, курсы, презентации, модели, анимированные изображения, видео - кейсы, библиотеки, контрольно-измерительные материалы и др.);
- расчетные и расчетно-графические работы;
- чертежные работы;
- подготовка к семинарам, практическим и лабораторным занятиям, в том числе по материалам электронных учебных изданий,

специализированных тематических сайтов, электронных копий научных статей и т. п.;

- составление отчетов по лабораторным работам;
- переводы иностранного текста (внеаудиторное чтение);
- составление электронного аннотированного списка статей из соответствующих журналов и сайтов по отраслям знаний;
- научный эксперимент, размышления и обсуждения, выполнение микроисследований с представлением их результатов в виде электронных презентаций, таблиц, сводных графиков и т. п.;
- выполнение логических заданий в условиях проблемных ситуаций;
- осуществление самоконтроля (компьютерное тестирование и т. д.);
- подготовка к модулю;
- подготовка к тестированию;
- написание рефератов, эссе, докладов, отчетов по практике в виде электронного документа или с подготовкой презентации;
- подготовка к деловой игре, оформление её результатов и др.
- выполнение домашних заданий в виде решения отдельных задач, проведения типовых расчетов, индивидуальных работ по отдельным разделам содержания дисциплин и т. д.;
- проработка тем, вынесенных в рабочей программе дисциплины на самостоятельное изучение;
- выполнение курсовых работ/проектов;
- подготовка к контрольной работе.

Формы, объем и содержание заданий по СРС устанавливается кафедрой в соответствии с учебными планами и рабочими программами учебных дисциплин.

2. ПЛАНИРОВАНИЕ СРС

Основой для планирования СРС являются:

- федеральный государственный образовательный стандарт высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) и государственный образовательный стандарт высшего профессионального образования (ГОС ВПО);
- учебный план специальности (направления подготовки);

- рабочая программа дисциплины.

В соответствии с требованиями ГОС ВПО и ФГОС ВПО объем изучаемых дисциплин в рабочих учебных планах установлен (нормирован) в академических часах и включает в себя аудиторную и самостоятельную (внеаудиторную) работу студентов. Трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине определяется из рабочих учебных планов.

Затраты времени на выполнение всех форм СРС по каждой дисциплине строго соответствуют действующему учебному плану специальности (направления подготовки), а содержание - требованиям основной образовательной программы ВПО.

Методика планирования самостоятельной работы складывается из следующих элементов:

$$T_{\text{сум}} = T_{\text{лп}} + T_{\text{сп}} + T_{\text{зэ}} + T_{\text{из}},$$

$T_{\text{сум}}$ – суммарное время на СРС по данной дисциплине, определенное учебным планом, ч;

$T_{\text{лп}}$ – время на подготовку к лекциям, лабораторным, практическим, семинарским занятиям, ч;

$T_{\text{сп}}$ – время на самостоятельное изучение разделов и тем учебной дисциплины;

$T_{\text{зэ}}$ - время на подготовку к зачетам и экзаменам;

$T_{\text{из}}$ - время на самостоятельное выполнение индивидуальных заданий (курсовой проект, курсовая работа, расчетно-графическая работа, конспект, реферат, упражнение и др.).

Сведения о СРС указываются в рабочей программе каждой дисциплины и утверждаются зав. кафедрой и деканом до начала учебного семестра. В них указываются перечень выполняемых работ, их содержание, объем заданий в часах, сроки выполнения и проведения контроля.

После ознакомления с этой информацией, каждый студент составляет график самостоятельной работы и график сдачи модулей с указанием сроков их выполнения.

При составлении графика СРС необходимо исходить из условий:

- согласования сроков выполнения СРС по всем дисциплинам;
- обеспечения ритмичности работы в течение семестра;

- отсутствия перегрузки заданиями в течение какой-либо недели.

Рекомендуется планировать завершение на одной неделе не более 2 заданий по СРС.

3. ОРГАНИЗАЦИОННО - МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ СРС

Организационно-методическое обеспечение СРС включает разработку и проведение комплекса мероприятий по планированию и организации СРС:

- планирование СРС;
- обеспечение учебной литературой, методическими пособиями, в том числе электронными учебными изданиями, компьютерной техникой, программными продуктами;
- создание учебно-лабораторной базы и ее оснащение в соответствии с содержанием самостоятельной работы по курсам учебных дисциплин;
- создание необходимых условий для СРС в общежитиях, библиотеках, читальных залах, компьютерных классах.

Активизация СРС при проведении различных видов учебных занятий включает:

- переработку учебных планов и программ в рамках существующих ГОСов и ФГОСов с целью увеличения доли СРС. При этом должна учитываться обеспеченность тем и разделов учебной литературой и ее доступность для всех обучающихся;
- оптимизацию методов обучения, внедрение в учебный процесс современных образовательных и информационных технологий с учетом компетентностного подхода;
- разработку собственных электронных учебных изданий на основе имеющихся инструментов и средств;
- совершенствование системы текущего оперативного контроля СРС в течение семестра (использование возможностей балльно-рейтинговой системы, компьютеризированного тестирования и др.);
- совершенствование методики проведения практик и научно-исследовательской работы студентов;

- модернизацию системы курсового и дипломного проектирования для увеличения самостоятельности студентов на всех этапах работы.

Работа по учебно-методическому и техническому обеспечению СРС включает:

- определение тем дисциплины для самостоятельного изучения;
- определение форм самостоятельной работы;
- определение приемов контроля результатов СРС;
- техническое обеспечение СРС с использованием дистанционных образовательных технологий;
- обучение и консультация профессорско-преподавательского состава по разработке электронных учебных изданий и применению дистанционных образовательных технологий;
- разработка нового специализированного ПО.

Руководство СРС осуществляется преподавателями кафедры. В функции преподавателя входит:

- разработка календарно-тематического плана выполнения СРС по учебному курсу;
- определение объема учебного содержания и количества часов, отводимых на СРС, с учетом компетентностного подхода;
- подготовка пакета контрольно-измерительных материалов и определение периодичности контроля;
- определение системы индивидуальной работы со студентами.

Мониторинг СРС предусматривает организацию и корректировку учебной деятельности студентов, помощи при возникающих затруднениях. Контроль СРС предусматривает соотнесение содержания контроля с целями обучения; соответствие предъявляемых заданий тому, что предполагается проверить; дифференциацию контрольно-измерительных материалов.

К видам контроля СРС относятся

- текущий (оперативный) контроль;
- рубежный контроль;
- итоговый контроль (зачет, экзамен);
- самоконтроль.

Формами контроля СРС являются

- устный контроль;
- письменный контроль;
- тестовый контроль.

В качестве примеров можно привести блиц-опрос, индивидуальные собеседования, проверка выполнения домашних заданий, обсуждение рефератов, анализ производственных ситуаций, дискуссия, пресс-конференция, решение задач, защита курсовых работ, отчетов по практике и др.

Примерами реализации форм контроля СРС с использованием дистанционных образовательных технологий могут быть указанные в табл. 1.

Таблица 1

Формы контроля	Возможные способы реализации в СРС
текущий (оперативный) контроль	- тестовые задания
рубежный контроль	- тестовые задания - электронная письменная работа, презентация - индивидуальное или групповое задание
итоговый контроль (зачет/экзамен)	- тестовые задания - электронная письменная работа, презентация - индивидуальное или групповое задание - on-line общение через средства телекоммуникаций: электронной почты, чаты, ICQ, SKYPE, вебинары и др.
самоконтроль	- тестовые задания

4. ЗАДАНИЕ К САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЕ

В рамках изучения студентами дисциплины «Наноэлектроника» предусматривается выполнение следующей самостоятельной работы.

Студенты могут при самостоятельном изучении отдельных тем и вопросов дисциплин пользоваться учебно-наглядными пособиями, учебным оборудованием и методическими разработками кафедры в рабочее время, установленное Правилами внутреннего распорядка работников.

Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы обучающихся по данной дисциплине организуется:

библиотекой университета:

- библиотечный фонд укомплектован учебной, методической, научной, периодической, справочной и художественной литературой в соответствии с УП и данной РПД;

- имеется доступ к основным информационным образовательным ресурсам, информационной базе данных, в том числе библиографической, возможность выхода в Интернет.

кафедрой:

- путем обеспечения доступности всего необходимого учебно-методического и справочного материала;

- путем предоставления сведений о наличии учебно-методической литературы, современных программных средств.

Самостоятельная работа студентов по дисциплине «Компьютерная химия» проводится по следующим разделам:

№ раздела (темы)	Наименование раздела(темы) дисциплины	Срок выполнения	Время, затрачиваемое на выполнение СРС, час.
1	2	3	4
1.	Введение. Предмет компьютерной химии	2 неделя	2
2.	Вариационный принцип.	3 неделя	2
3.	Атом в магнитном поле	5 неделя	4
4.	Химическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма.	6 неделя	2
5.	Приближение Борна-Оппенгеймера.	7 неделя	2
6.	Электронная корреляция.	9 неделя	2
7.	Иерархия методов квантовой химии.	10 неделя	2
8.	Методы, основанные на частичном и полном пренебрежении дифференциальным перекрыванием	11 неделя	2
9.	Открытые оболочки в методе самосогласованного поля Хартри-Фока-Рутана	12 неделя	4
10.	Орбитальная картина химической связи.	13 неделя	2

11.	Пространственное распределение электронной плотности.	14 неделя	2
12.	Электронное строение многоатомных молекул.	15 неделя	2
13.	Квантовохимический анализ межмолекулярных взаимодействий	16 неделя	2
14.	Специфические невалентные взаимодействия.	17 неделя	2
15	Квантово-химическое описание химических реакций в газовой фазе.	18 неделя	4
Итого			36

Основная учебная литература

1. . Крашенинин В. И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс]: учебное пособие / В. И. Крашенинин, Е. Г. Газенаур, Л. В. Кузьмина. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012. - 56 с. // Режим доступа – <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>

Дополнительная учебная литература

2. Веселов М. Г. Элементарная квантовая теория атомов и молекул [Электронный ресурс]: учебное пособие / М. Г. Веселов. - 2-е изд., доп. - М. : Гос. изд-во физико-математической лит., 1962. - 215 с. // Режим доступа - <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=211942>

3. Чертов А. Г. Задачник по физике [Текст] : учебное пособие / А. Г. Чертов, А. А. Воробьев. - 7-е изд., перераб. и доп. - М. : Физико-математической литературы, 2003. - 640 с.

4. Родионов А. А. Квантовая химия [Текст] : учебное пособие / А. А. Родионов; Юго-Западный государственный университет. - Курск : ЮЗГУ, 2011. - 246 с.

5. Родионов А. А. Квантовая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие / А. А. Родионов; Юго-Западный государственный университет. - Курск : ЮЗГУ, 2011. - 246 с.

6. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учебник для студентов вузов / Н. Ф. Степанов. - М. : Мир, 2001. - 519 с.

7. Цирельсон В. Г. Многоэлектронный атом [Текст] / В. Г. Цирельсон, М. Ф. Бобров. - М.: РХТУ, 2004. - 51 с.

8. Апостолова Е. С. Квантово-химическое описание реакций [Текст] / Е. С. Апостолова, А. И. Михайлюк, В. Г. Цирельсон. - М.: РХТУ, 1999. - 61 с.

9. Цирельсон В. Г. Квантовая химия молекул [Текст] В. Г. Цирельсон, М. Ф. Бобров. - М.: РХТУ, 2000. – 83 с.

10. Цирельсон В. Г. Химическая связь и межмолекулярное взаимодействие [Текст]. - М.: РХТУ, 2004. – 108 с.

11. Минкин В. И. Теория строения молекул [Текст] / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - Ростов: Феникс, 1997. - 407 с.
12. Минкин В. И. Квантовая химия органических соединений [Текст] / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - М.: Химия, 1986. - 246 с.
13. Жидомиров Г. И. Квантовохимические расчеты магнитно-резонансных параметров [Текст] / Г. И. Жидомиров, П. В. Счастнев, Н. Д. Чувылкин. - Новосибирск: Наука, 1978. - 367 с.
14. Жидомиров Г. И. Прикладная квантовая химия [Текст] / Г. И. Жидомиров, А. А. Багатурьянц, И. А. Абронин. - М.: Химия, 1979. – 295 с.
15. Кларк Т. Компьютерная химия [Текст]. - М.: Мир, 1990. – 383 с.

Другие учебно-методические материалы

Отраслевой научно-технические журнал в библиотеке университета:
«Нанотехнологии: наука и производство».

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. <http://www.strf.ru/> - Интернет- издание «Наука и технологии России – strf.ru»
2. <http://www.nanometer.ru/> -сайт "Нанометр"
3. <http://www.rusnano.com/> - Группа РОСНАНО
4. <http://thesaurus.rusnano.com>- Словарь нанотехнологических и связанных с нанотехнологиями терминов.
5. <http://biblioclub.ru> - Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека онлайн».