

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«Самарский государственный технический университет» $(\Phi \Gamma EOV BO \ «Сам \Gamma T У»)$

УТЕ	ВЕРЖДАЮ	:
Про	оректор п	о учебной работе
		/ О.В. Юсупова
П	П	20 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.07 «Вычислительные методы в химии»

Код и направление подготовки (специальность)	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия		
Направленность (профиль)	Органическая химия		
Квалификация	Химик. Преподаватель химии.		
Форма обучения	Очная		
Год начала подготовки	2022		
Институт / факультет	Химико-технологический факультет (ХТФ)		
Выпускающая кафедра	кафедра "Органическая химия"		
Кафедра-разработчик	кафедра "Органическая химия"		
Объем дисциплины, ч. / з.е.	144 / 4		
Форма контроля (промежуточная аттестация)	Экзамен		

Б1.В.07 «Вычислительные методы в химии»

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки (специальности) **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**, утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ от № 652 от 13.07.2017 и соответствующего учебного плана.

Разработчик РПД:

Профессор, доктор химических наук, профессор

(должность, степень, ученое звание)

Заведующий кафедрой

А.К Ширяев

(ΦΝΟ)

Ю.Н. Климочкин, доктор химических наук, профессор

(ФИО, степень, ученое звание)

СОГЛАСОВАНО:

Председатель методического совета факультета / института (или учебнометодической комиссии)

Руководитель образовательной программы

О.В Лаврентьева, кандидат химических наук, доцент

(ФИО, степень, ученое звание)

Ю.Н. Климочкин, доктор химических наук, профессор

(ФИО, степень, ученое звание)

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми	1
результатами освоения образовательной программы	4
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы	6
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов,	
выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на	
самостоятельную работу обучающихся	7
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам), с указанием отведенного	на
них количества академических часов и видов учебных занятий	8
4.1 Содержание лекционных занятий	8
4.2 Содержание лабораторных занятий	
4.3 Содержание практических занятий	11
4.4. Содержание самостоятельной работы	12
5. Перечень учебной литературы и учебно-методического обеспечения по дисциплине (модулю)	13
6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса	à
по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения	13
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», профессиональных баз	
данных, информационно-справочных систем	14
8. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесс	ca
по дисциплине (модулю)	
9. Методические материалы	15
10. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)	17

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть, соотнесенные с индикаторами достижения компетенции)
	Проф	ессиональные компетенции	
Не предусмотрено	ПК-1 Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-1.1 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Владеть экспериментальными и расчетно-теоретическими методами решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
			Знать основы планирования и методы решения научно- исследовательских задач в вы-бранной области химии
			Уметь составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий
	ПК-3 Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-3.1 Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	Владеть навыками определения возможных направлений развития работ в выбранной области химии
			Знать методы оценки перспектив и практического применения результатов НИР и НИОКР в выбранной области химии
			Уметь систематизировать и анализировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР.

	ПК-8 Способен планировать стратегию решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	ПК-8.3 Использует теоретические представления для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул	Владеть теоретическими представлениями для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул
			Знать основные методы решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений
			Уметь планировать стратегию решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений
		ПК-8.4 Использует знания о типовых экспериментальных и расчётных методах органической химии для планирования и реализации задач исследования органических молекул	Владеть теоретическими представлениями для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул
			Знать основные методы решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений
			Уметь планировать стратегию решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений
	Уни	версальные компетенции	
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий		УК-1.2 Определяет пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектирует процессы по их устранению	Владеть навыками выработки стратегии действий по преодолению проблемной ситуации

	Знать способы анализа проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними
	Уметь осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы: базовая часть

Код комп етен ции	Предшествующие дисциплины	Параллельно осваиваемые дисциплины	Последующие дисциплины
ПК-1	Информационные технологии в химии; Пространственное строение молекул; Химическое моделирование	Строение и реакционная способность органических соединений	Основы молекулярной биологии; Планирование и методы органического синтеза; Подготовка к процедуре защиты и процедура защиты выпускной квалификационной работы; Производственная практика: научно-исследовательская работа, выделенная; Производственная практика: научно-исследовательская работа, рассредоточенная; Производственная практика: преддипломная практика; Современные методы идентификации и выделения органических соединений
ПК-3	Пространственное строение молекул	Строение и реакционная способность органических соединений	История и методология химии; Основы молекулярной биологии; Планирование и методы органического синтеза; Подготовка к процедуре защиты и процедура защиты выпускной квалификационной работы; Производственная практика: научно- исследовательская работа, выделенная; Производственная практика: научно- исследовательская работа, рассредоточенная; Производственная практика: преддипломная практика

ПК-8	Пространственное строение молекул	Строение и реакционная способность органических соединений	Катализ в органическом синтезе; Кинетические методы в органической химии; Методы энантиоселективного синтеза; Подготовка к процедуре защиты и процедура защиты выпускной квалификационной работы; Производственная практика: научно-исследовательская работа, выделенная; Производственная практика: научно-исследовательская работа, рассредоточенная; Производственная; Производственная практика: преддипломная практика: преддипломная практика; Современные методы идентификации и выделения органических соединений; Химия алициклических и каркасных соединений; Химия природных органических соединений; Химия элементоорганических соединений; Химия элементоорганических соединений
УК-1	Информационные технологии в химии; Квантовая химия; Математика; Органическая химия; Правоведение; Уравнения математической физики; Учебная практика: ознакомительная практика; Физика; Философия; Химическое моделирование; Экономика	Органическая химия	История и методология химии; Методика преподавания химии; Планирование и методы органического синтеза; Подготовка к процедуре защиты и процедура защиты выпускной квалификационной работы; Производственная практика: научно-исследовательская работа, выделенная; Производственная практика: научно-исследовательская работа, рассредоточенная; Производственная практика: педагогическая практика: педагогическая практика: преддипломная практика; Психология и педагогика; Современные методы идентификации и выделения органических соединений

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Вил учебной паботы	Всего часов / часов в электронной форме	6 семестр часов / часов в электронной форме	
Аудиторная контактная работа (всего), в том числе:	64	64	

Лабораторные работы	32	32
Лекции	16	16
Практические занятия	16	16
Внеаудиторная контактная работа, КСР	10	10
Самостоятельная работа (всего), в том числе:	25	25
подготовка к лабораторным работам	25	25
Контроль	45	45
Итого: час	144	144
Итого: з.е.	4	4

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам), с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

Nº	Наименование раздела дисциплины		Виды учебной нагрузки и их трудоемкость, часы			
раздела		ЛЗ	ЛР	П3	СРС	Всего часов
1	Квантово-химические расчёты	12	28	14	20	74
2	Методы силового поля	4	4	2	5	15
	КСР	0	0	0	0	10
	Контроль	0	0	0	0	45
	Итого	16	32	16	25	144

4.1 Содержание лекционных занятий

№ занятия	Наименование раздела	Тема лекции	Содержание лекции (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов)	Количество часов / часов в электронной форме
		6 cei	местр	
1	Квантово-химические расчёты	Подготовка данных для квантово- химических программ.	Подготовка данных для квантово- химических программ. Работа в структурном и графическом ре-жимах химического редактора ChemSketch. Рисование структур, их трёхмерная оптимизация, построение начальной геометрии для оптимизации геометрических параметров квантово- химическими методами. Картезианские координаты и Z-матрица.	2

Итого:				16
			Итого за семестр:	16
8	Методы силового поля	Методы прогнозирования свойств молекул.	Методы прогнозирования свойств молекул. Методы силового поля, корреляционные уравнения, молекулярные дискрипторы. Применение теории графов для описания структуры молекул: матрица связности, матрица расстояний, индексы Винера, Балабана и др. Метод молекулярного докинга, программы и сервисы, реализующие молекулярный докинг: AutoDock, Dicovery Studio.	2
7	Методы силового поля	Энергетические вклады в методах силового поля	Энергетические вклады, оптимизация геометрии, типы силовых полей. Программы, реализующие методы силового поля: Avogadro, TINKER. Анализ конформационного равновесия, геометрии органических молекул. Типы силовых полей	2
6	Квантово-химические расчёты	Расчет термохимических параметров	Расчет термохимических параметров, приведение результатов расчета к нормальным условиям (298.15 К). Расчет сольватационных эффектов. Применение результатов расчета конформационного равновесия для вычисления углов удельного вращения и подтверждения конфигурации соединения.	2
5	Квантово-химические расчёты	Оптимизация геометрии молекул	Расчет геометрии молекул, зависимость сходимости от размера базиса и качества начальной геометрии. Расчет корреляционной энергии. Методы КВ, МР2, связанных кластеров, ДФТ. Проблема поиска структур переходных состояний. Расчет конформационного равновесия.	2
4	Квантово-химические расчёты	Анализ результатов квантово-химических расчётов	Анализ результатов квантово- химических расчётов, построение графика изменения энергии в процессе расчета, визуализация молекулярных орбиталей, пере-счет канонических орбиталей в локализованные. Создание слайдов и видиороликов, иллюстрирующих превращение одной структуры в другую.	2
3	Квантово-химические расчёты	Программа визуализации квантово-химических расчетов	Программа визуализации квантово- химических расчетов Мас-MolPLT. Перенос структур из других программ, рисование структур, их оптимизация путем редактирования Z-матрицы. Изменение нумерации атомов, "замораживание" отдельных координат для поиска переходных со- стояний. Создание исходного файла для программы GAMESS.	2
2	Квантово-химические расчёты	Структура программы GAMESS	Структура программы GAMESS. Команды и группы команд про-граммы GAMESS. Основные типы расчётов, реализуемые в про-грамме. Теоретические методы и базисы. Алгоритм квантово-химических расчётов. Оптимизация структуры молекулы методом Ньютона-Рафсона.	2

4.2 Содержание лабораторных занятий

№ занятия	Наименование раздела	Тема лабораторного занятия	Содержание лабораторного занятия (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов)	Количество часов / часов в электронной форме
		6 cei	честр	
1	Квантово-химические расчёты	Изображение молекулярных структур в химическом редакторе ChemSketch.	Рисование структур, их трёхмерная оптимизация, построение начальной геометрии для оптимизации геометрических параметров квантовохимическими методами. Картезианские (декартовы) координаты и внутренние координаты, Z-матрица.	2
2	Квантово-химические расчёты	Изображение молекулярных структур в химическом редакторе ChemSketch (продолжение)	Рисование структур, их трёхмерная оптимизация, построение начальной геометрии для оптимизации геометрических параметров квантовохимическими методами. Картезианские (декартовы) координаты и внутренние координаты, Z-матрица.	2
3	Квантово-химические расчёты	Программа визуализации квантово-химических расчетов MacMolPLT.	Рисование структур, их оптимизация путем редактирования Z-матрицы. Изменение нумерации атомов, "замораживание" отдельных координат для поиска переходных состояний. Создание исходного файла для про-граммы GAMESS. Алгоритм квантово-химического расчёта на примере молекулы метана.	2
4	Квантово-химические расчёты	Программа визуализации квантово-химических расчетов MacMolPLT (продолжение)	Рисование структур, их оптимизация путем редактирования Z-матрицы. Изменение нумерации атомов, "замораживание" отдельных координат для поиска переходных состояний. Создание исходного файла для про-граммы GAMESS. Алгоритм квантово-химического расчёта на примере молекулы метана.	2
5	Квантово-химические расчёты	Анализ результатов квантово-химических расчётов	Анализ результатов квантово- химических расчётов, построение графика изменения энергии в процессе расчета, визуализация молекулярных орбиталей, пересчет канонических орбиталей в локализованные.	2
6	Квантово-химические расчёты	Анализ результатов квантово-химических расчётов (продолжение)	Анализ результатов квантово- химических расчётов, построение графика изменения энергии в процессе расчета, визуализация молекулярных орбиталей, пересчет канонических орбиталей в локализованные.	2
7	Квантово-химические расчёты	Создание молекулярных слайдов и видеороликов	Создание слайдов и видеороликов, иллюстрирующих превращение одной структуры в другую.	2
8	Квантово-химические расчёты	Создание молекулярных слайдов и видеороликов (продолжение)	Создание слайдов и видеороликов, иллюстрирующих превращение одной структуры в другую.	2

			Итого:	32
			Итого за семестр:	32
16	Методы силового поля	Оптимизация геометрии молекул методом молекулярной механики (продолжение)	Расчёт геометрии молекул методом молекулярной механики с помощью программы Avogadro. Анализ конформационного состава алканов и их простейших функциональных производных.	2
15	Методы силового поля	Оптимизация геометрии молекул методом молекулярной механики	Расчёт геометрии молекул методом молекулярной механики с помощью программы Avogadro. Анализ конформационного состава алканов и их простейших функциональных производных.	2
14	Квантово-химические расчёты	Расчёт переходных состояний простых реакций (продолжение)	Расчёт переходных состояний простых реакций и их энергии активации с помощью программы GAMESS.	2
13	Квантово-химические расчёты	вантово-химические состояний простых реакц	Расчёт переходных состояний простых реакций и их энергии активации с помощью программы GAMESS.	2
12	Квантово-химические расчёт конформационного равновесия (продолжение) Расчёт конформационного простых молекул с помощью программы GAMESS.			2
11	Квантово-химические расчёты	Расчёт конформационного равновесия	Расчёт конформационного состава простых молекул с помощью программы GAMESS.	2
10	Квантово-химические расчёты	Расчёт колебательного спектра простых молекул (продолжение)	Расчёт геометрии, электронной структуры, термохимии и колебательного спектра простых молекул с помощью программы GAMESS.	2
9	Квантово-химические расчёты	Расчёт колебательного спектра простых молекул	Расчёт геометрии, электронной структуры, термохимии и колебательного спектра простых молекул с помощью программы GAMESS.	2
			D"	

4.3 Содержание практических занятий

№ занятия	Наименование раздела	Тема практического занятия	Содержание практического занятия (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов)	Количество часов / часов в электронной форме		
	6 семестр					
1 Квантово-химические струк расчёты хими редак		Изображение молекулярных структур в химическом редакторе ChemSketch.	Рисование структур, их трёхмерная оптимизация. Построение Z-матрицы (внутренних координат) для простейших молекул.	2		

			Итого:	16
			Итого за семестр:	16
8	Методы силового поля	Оптимизация геометрии молекул методом молекулярной механики	Оптимизация молекул методом молекулярной механики. Энергетические вклады и типы силовых полей.	2
7	Квантово-химические расчёты	Расчёт переходных состояний простых реакций	Анализ переходных состояний и их расчёт для простых реакций . Расчёт энергии Гиббса активации при нормальных условиях.	2
6	Квантово-химические расчёты	Расчёт конформационного равновесия	Расчёт конформационного состава простых молекул с помощью программы GAMESS.	2
5	Квантово-химические расчёты	Расчёт колебательного спектра простых молекул	Расчёт термохимии и колебательного спектра простых молекул с помощью программы GAMESS.	2
4	Квантово-химические расчёты	Создание молекулярных слайдов и видеороликов	Создание слайдов и видеороликов, иллюстрирующих превращение одной структуры в другую	2
3	Квантово-химические расчёты	Анализ результатов квантово-химических расчётов	Анализ файла результатов квантово- химических расчётов, визуализация молекулярных орбиталей, пересчет канонических орбиталей в локализованные.	2
2	Квантово-химические расчёты	Программа визуализации квантово-химических расчетов Mac-MoIPLT.	Редактирование Z-матрицы. Изменение нумерации атомов, "замораживание" отдельных координат для поиска переходных состояний. Создание исходного файла для про-граммы GAMESS. Алгоритм квантовохимического расчёта на примере молекулы метана.	2

4.4. Содержание самостоятельной работы

Наименование раздела	Вид самостоятельной работы	Содержание самостоятельной работы (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов)	Количество часов		
6 семестр					

Итого:			
		Итого за семестр:	25
Методы силового поля	Подготовка к лабораторным занятиям.	Рисование структур, их трёхмерная оптимизация с помощью программы Avogadro	5
Квантово-химические расчёты	Подготовка к лабораторным занятиям.	Рисование структур, их трёхмерная оптимизация, построение начальной геометрии для оптимизации геометрических пара-метров квантовохимическими методами. Картезианские (декартовы) координаты и внутренние координаты, Z-матрица. Анализ результатов квантово-химических расчётов, построение графика изменения энергии в процессе расчета, визуализация молекулярных орбиталей, пересчет канонических орбиталей в локализованные. Создание слайдов и видеороликов, иллюстрирующих превращение одной структуры в другую.	20

5. Перечень учебной литературы и учебно-методического обеспечения по дисциплине (модулю)

№ п/п	Библиографическое описание	Pecypc HTБ CaмГТУ (ЭБС СамГТУ, IPRbooks и т.д.)		
	Основная литература			
1	Кларк, Т. Компьютерная химия : Практ.рук.по расчетам структуры и энергии молекулы:Пер.с англ. / Под ред.:В.С.Мастрюкова,Ю.Н.Панченко М., Мир, 1990 381 с.	Электронный ресурс		
2	Ширяев, А.К. Квантовая химия : учебное пособие / А. К. Ширяев; Самарский государственный технический университет, Органическая химия 3-е изд., испр. и доп Самара, 2021 132 с Режим доступа: https://elib.samgtu.ru/getinfo?uid=els_samgtu elib 5474	Электронный ресурс		
	Дополнительная литература			
3	Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView; СОЛОН-ПРЕСС, 2017 Режим доступа: https://elib.samgtu.ru/getinfo?uid=els_samgtu iprbooks 90299	Электронный ресурс		

Доступ обучающихся к ЭР НТБ СамГТУ (elib.samgtu.ru) осуществляется посредством электронной информационной образовательной среды университета и сайта НТБ СамГТУ по логину и паролю.

6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения

При проведении лекционных занятий используется мультимедийное оборудование.

Организовано взаимодействие обучающегося и преподавателя с использованием электронной ин-формационной образовательной среды университета.

№ п/п	Наименование	Производитель	Способ распространения
1	ChemSketch	acd/labs (Зарубежный)	Свободно распространяемое
2	GAMESS	Gordon's group, University of Iowa (Зарубежный)	Свободно распространяемое
3	Avogadro	Avogadro Chemistry (Зарубежный)	Свободно распространяемое
4	MacMolPLT	Brett Bode (Зарубежный)	Свободно распространяемое

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», профессиональных баз данных, информационно-справочных систем

№ п/п	Наименование	Краткое описание	Режим доступа
1	Журналы Американского химического общества Web Edition	http://www.acs.org/content/acs/en.html	Зарубежные базы данных ограниченного доступа
2	ScienceDirect (Elsevier) - естественные науки, техника, медицина и общественные науки.	http://www.sciencedirect.com/	Зарубежные базы данных ограниченного доступа
3	Электронная библиотека изданий СамГТУ	http://irbis.samgtu.local/cgi-bin/irbis64r_01/cgiirbis_64.exe	Российские базы данных ограниченного доступа

8. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Лекционные занятия

Аудитории для лекционных занятий укомплектованы мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории (наборы демонстрационного оборудования (проектор, экран, компьютер/ноутбук), учебно-наглядные пособия, тематические иллюстрации).

Практические занятия

. Аудитории для практических занятий укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения (проектор, экран, компьютер/ноутбук).

Лабораторные занятия

Компьютерный класс, укомплектованный современными компьютерами с установленным на них программным обеспечением для выполнения квантово-химических и молекулярно-механических расчётов молекул.

Самостоятельная работа

Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с возможностью

подключения к сети «Интернет» и доступом к электронной информационно-образовательной среде СамГТУ:

- читальный зал НТБ СамГТУ (ауд. 200 корпус № 8; ауд. 125 корпус № 1; ауд. 41, 31, 34, 35 Главный корпус библиотеки, ауд. 83а, 414, 416, 0209 АСА СамГТУ; ауд. 401 корпус №10);
 - компьютерные классы (ауд. 208, 210 корпус № 8).

9. Методические материалы

Методические рекомендации при работе на лекции

До лекции студент должен просмотреть учебно-методическую и научную литературу по теме лекции с тем, чтобы иметь представление о проблемах, которые будут разбираться в лекции.

Перед началом лекции обучающимся сообщается тема лекции, план, вопросы, подлежащие рассмотрению, доводятся основные литературные источники. Весь учебный материал, сообщаемый преподавателем, должен не просто прослушиваться. Он должен быть активно воспринят, т.е. услышан, осмыслен, понят, зафиксирован на бумаге и закреплен в памяти. Приступая к слушанию нового учебного материала, полезно мысленно установить его связь с ранее изученным. Следя за техникой чтения лекции (акцент на существенном, повышение тона, изменение ритма, пауза и т.п.), необходимо вслед за преподавателем уметь выделять основные категории, законы и определять их содержание, проблемы, предполагать их возможные решения, доказательства и выводы. Осуществляя такую работу, можно значительно облегчить себе понимание учебного материала, его конспектирование и дальнейшее изучение.

Конспектирование лекции позволяет обработать, систематизировать и лучше сохранить полученную информацию с тем, чтобы в будущем можно было восстановить в памяти основные, содержательные моменты. Типичная ошибка, совершаемая обучающимся, дословное конспектирование речи преподавателя. Как правило, при записи «слово в слово» не остается времени на обдумывание, анализ и синтез информации. Отбирая нужную информацию, главные мысли, проблемы, решения и выводы, необходимо сокращать текст, строить его таким образом, чтобы потом можно было легко в нем разобраться. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых можно будет делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. С окончанием лекции работа над конспектом не может считаться завершенной. Нужно еще восстановить отдельные места, проверить, все ли понятно, уточнить что-то на консультации и т.п. с тем, чтобы конспект мог быть использован в процессе подготовки к практическим занятиям, зачету, экзамену. Конспект лекции – незаменимый учебный документ, необходимый для самостоятельной работы.

Методические рекомендации при подготовке и работе на практическом занятии

Практические занятия по дисциплине проводятся в целях выработки практических умений и приобретения навыков в решении профессиональных задач.

Рекомендуется следующая схема подготовки к практическому занятию:

- 1. ознакомление с планом практического занятия, который отражает содержание предложенной темы;
 - 2. проработка конспекта лекции;
 - 3. чтение рекомендованной литературы;
 - 4. подготовка ответов на вопросы плана практического занятия;
 - 5. выполнение тестовых заданий, задач и др.

Подготовка обучающегося к практическому занятию производится по вопросам, разработанным для каждой темы практических занятий и (или) лекций. В процессе подготовки к практическим занятиям, необходимо обратить особое внимание на самостоятельное изучение рекомендованной литературы.

Работа студентов во время практического занятия осуществляется на основе заданий, которые выдаются обучающимся в начале или во время занятия. На практических занятиях приветствуется

активное участие в обсуждении конкретных ситуаций, способность на основе полученных знаний находить наиболее эффективные решения поставленных проблем, уметь находить полезный дополнительный материал по тематике занятий. Обучающимся необходимо обращать внимание на основные понятия, алгоритмы, определять практическую значимость рассматриваемых вопросов. На практических занятиях обучающиеся должны уметь выполнить расчет по заданным параметрам или выработать определенные решения по обозначенной проблеме. Задания могут быть групповые и индивидуальные. В зависимости от сложности предлагаемых заданий, целей занятия, общей подготовки обучающихся преподаватель может подсказать обучающимся алгоритм решения или первое действие, или указать общее направление рассуждений. Полученные результаты обсуждаются с позиций их адекватности или эффективности в рассмотренной ситуации.

Методические рекомендации при работе на лабораторном занятии

Проведение лабораторной работы делится на две условные части: теоретическую и практическую.

Необходимыми структурными элементами занятия являются проведение лабораторной работы, проверка усвоенного материала, включающая обсуждение теоретических основ выполняемой работы.

Перед лабораторной работой, как правило, проводится технико-теоретический инструктаж по использованию необходимого оборудования. Преподаватель корректирует деятельность обучающегося в процессе выполнения работы (при необходимости). После завершения лабораторной работы подводятся итоги, обсуждаются результаты деятельности.

Возможны следующие формы организации лабораторных работ: фронтальная, групповая и индивидуальная. При фронтальной форме выполняется одна и та же работа (при этом возможны различные варианты заданий). При групповой форме работа выполняется группой (командой). При индивидуальной форме обучающимися выполняются индивидуальные работы.

По каждой лабораторной работе имеются методические указания по их выполнению, включающие необходимый теоретический и практический материал, содержащие элементы и последовательную инструкцию по проведению выбранной работы, индивидуальные варианты заданий, требования и форму отчётности по данной работе.

Методические рекомендации по выполнению самостоятельной работы

Организация самостоятельной работы обучающихся ориентируется на активные методы овладения знаниями, развитие творческих способностей, переход от поточного к индивидуализированному обучению с учетом потребностей и возможностей обучающегося.

Самостоятельная работа с учебниками, учебными пособиями, научной, справочной литературой, материалами периодических изданий и Интернета является наиболее эффективным методом получения дополнительных знаний, позволяет значительно активизировать процесс овладения информацией, способствует более глубокому усвоению изучаемого материала. Все новые понятия по изучаемой теме необходимо выучить наизусть и внести в глоссарий, который целесообразно вести с самого начала изучения курса.

Самостоятельная работа реализуется:

- непосредственно в процессе аудиторных занятий;
- на лекциях, практических занятиях;
- в контакте с преподавателем вне рамок расписания;
- на консультациях по учебным вопросам, в ходе творческих контактов, при ликвидации задолженностей, при выполнении индивидуальных заданий и т.д.;
- в библиотеке, дома, на кафедре при выполнении обучающимся учебных и практических задач.

Эффективным средством осуществления обучающимся самостоятельной работы является электронная информационно-образовательная среда университета, которая обеспечивает доступ к учебным планам, рабочим программам дисциплин (модулей), практик, к изданиям электронных библиотечных систем.

10. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств представлен в приложении № 1.

Приложение 1 к рабочей программе дисциплины Б1.В.07 «Вычислительные методы в химии»

Фонд оценочных средств по дисциплине Б1.В.07 «Вычислительные методы в химии»

код и направление подготовки (специальность)	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия		
Направленность (профиль)	Органическая химия		
Квалификация	Химик. Преподаватель химии.		
Форма обучения	Очная		
Год начала подготовки	2022		
Институт / факультет	Химико-технологический факультет (ХТФ)		
Выпускающая кафедра	кафедра "Органическая химия"		
Кафедра-разработчик	кафедра "Органическая химия"		
Объем дисциплины, ч. / з.е.	144 / 4		
Форма контроля (промежуточная аттестация)	Экзамен		

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть, соотнесенные с индикаторами достижения компетенции)					
	Профессиональные компетенции							
Не предусмотрено	ПК-1 Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научноисследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-1.1 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Владеть экспериментальными и расчетно-теоретическими методами решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов					
			Знать основы планирования и методы решения научно- исследовательских задач в вы-бранной области химии					
			Уметь составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий					
	ПК-3 Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-3.1 Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	Владеть навыками определения возможных направлений развития работ в выбранной области химии					
			Знать методы оценки перспектив и практического применения результатов НИР и НИОКР в выбранной области химии					
			Уметь систематизировать и анализировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР.					

	TI(0.0 5			
	ПК-8 Способен планировать стратегию решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	ПК-8.3 Использует теоретические представления для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул	Владеть теоретическими представлениями для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул	
			Знать основные методы решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	
			Уметь планировать стратегию решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	
		ПК-8.4 Использует знания о типовых экспериментальных и расчётных методах органической химии для планирования и реализации задач исследования органических молекул	Владеть теоретическими представлениями для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул	
			Знать основные методы решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	
			Уметь планировать стратегию решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	
Универсальные компетенции				
Системное и критическое мышление	УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.2 Определяет пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектирует процессы по их устранению	Владеть навыками выработки стратегии действий по преодолению проблемной ситуации	

Знать способы анализа проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними
Уметь осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода

Матрица соответствия оценочных средств запланированным результатам обучения

Код индикатора достижения компетенции	Результаты обучения	Оценочные средства	Текущий контроль успеваем ости	Промежу точная аттестац ия
	Квантово-химические расчёть	ı		
ПК-1.1 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Владеть экспериментальными и расчетно- теоретическими методами решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Устный опрос	Да	Нет
	Уметь составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий	Устный опрос	Да	Нет
	Знать основы планирования и методы решения научно-исследовательских задач в вы-бранной области химии	Устный опрос	Нет	Да
ПК-3.1 Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	Знать методы оценки перспектив и практического применения результатов НИР и НИОКР в выбранной области химии	Устный опрос	Нет	Да
	Уметь систематизировать и анализировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР.	Устный опрос	Да	Нет
	Владеть навыками определения возможных направлений развития работ в выбранной области химии	Устный опрос	Да	Нет
ПК-8.3 Использует теоретические представления для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул	Уметь планировать стратегию решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	Устный опрос	Да	Нет
	Знать основные методы решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	Устный опрос	Нет	Да

Владеть теоретическими представлениями для прогорази и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул ПК-8.4 Использует знания о типовых экспериментальных и расчетных методах огранической имии для планирования и методам огранической имии для планирования и методам огранической имии для планирования органических соединений Владеть теоретический представлениями для прогорами исследования реакционной способности органических соединений Владеть теоретический представлениями для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, ситуации, и проектирует процессы по их устранению УК-1.2 Определяет довети в информации, необходимой для решения проблемный системы, выявляя ее составляющие и связи между имими Уметь осуществлять критический анализ проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между имими Уметь осуществлять критический анализ устный опрос да теоретические методы решения проблемных ситуаций на основе системного подхода ПК-1.1 Выбирает экспериментальные и дасчетно-теоретические методы решения проблемных ситуаций на основе системного подхода Владеть экспериментальными и расчетно-теоретические методы решения проблемных ситуаций на основе системного подхода Методы силового поля Методы силового поля Методы силового поля Владеть экспериментальными и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Знать основы планирования и методы решения научно-исспедовательских задач в вы-бранной объекти опставленной задачи исходя из имеющихся и методы решения научно-исспедовательских задач в вы-бранной объекти и детальные планы отдельных стадий план исследования и устный опрос да дагальные планы отдельных стадий план исследования и устный опрос да дагальные планы отдельных стадий план исследования и устный опрос да дагальные планы отдельных стадий план исследования и устный опрос дагальные планы отдельных стадий и практического пр		
ужеть планировать к и реаситации для планировать стратегию решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических молекул Знать основные методы решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию органических соединений Знать основные методы решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений Владеть теоретическими представлениями для прогноза и последующей интепретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул УК-1.2 Определяет пробелы в информации, необходимой для решения проблемной изтуации, и проектирует процессы по их устранению Укранению Знать способы анализа проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними Уметь осуществлять критический анализ проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними Уметь осуществлять критический анализ проблемного подхода Методы силового поля ПК-1.1 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения проставленной задач и исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Методы силового поля Владеть экспериментальными и расчетно-теоретические методы решения поставленной задач и исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Знать основы планирования и методы решения научно-исследовательских задач в вы-бранной области химии Уметь составлять общий план исследования и устный опрос Да ПК-3.1 Определяет возможные направления развития работ и перспективы Знать методы оценки перспектив и практического применения результатов НИР и Устный опрос Нет области химии Оставленной задачи и можда из межецихся материальных и временных ресурсов	претации свойств состава, Устный опрос Да Нет	прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава,
определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений Владеть теоретическими представлениями для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя и зи к остава, строения, пространственных структур молекул УК-1.2 Определяет проблемной ситроения, пространственных структур молекул Владеть навыками выработки стратегии действий по преодолению проблемной ситуации и проектирует процессы по их устранению Владеть навыками выработки стратегии действий по преодолению проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними Уметь сосуществлять критический анализ проблемных ситуации на основе системного подхода Методы силового поля ПК-1.1 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретическием методы решения поставленной задачи исходя из менеощихся материальных и временных ресурсов Владеть экспериментальными и расчетно-теоретическими методами решения поставленной задачи исходя из менеощихся материальных и временных ресурсов Владеть экспериментальными и расчетно-теоретическими методами решения поставленной задачи исходя из менеощихся материальных и временных ресурсов Владеть экспериментальными и расчетно-теоретическими методами решения научно-исследовательских задач в вы-бранной области химии Уметь осставлять общий план исследования и устный опрос Нет практического применения результатов НИР и Устный опрос Нет практического применения результатов НИР и	ификации и	знания о типовых экспериментальных и расчётных методах органической химии для планирования и реализации задач исследования
Прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул УК-1.2 Определяет пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и действий по преодолению проблемной ситуации, и действий по преодолению проблемной ситуации и действий по преодолению проблемной ситуации и действий по преодолению проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними Уметь сосуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода ПК-1.1 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Владеть экспериментальными и расчетно-теоретическими методами решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Владь основы планирования и методы решения научно-исследовательских задач в вы-бранной области химии Уметь составлять общий план исследования и устный опрос да ПК-3.1 Определяет возможные ПК-3.1 Определяет возможные планы развития работ и перспективы правления развития работ и перспективы практического применения результатов НИР и устный опрос	ификации и	определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности
пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектирует процессы по их устранению Знать способы анализа проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи Устный опрос Нет Методы силового поля Методы силового поля ПК-1.1 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Владеть экспериментальными и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Знать основы планирования и методы решения научно-исследовательских задач в вы-бранной Уметь осуществлять критические и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Знать основы планирования и методы решения научно-исследовательских задач в вы-бранной области химии Уметь составлять общий план исследования и устный опрос Да ПК-3.1 Определяет возможные направления развития работ и перспективы правления развития работ и перспективы правктического применения результатов НИР и Устный опрос Нет	претации свойств состава, Устный опрос Да Нет	прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава,
Системы, выявляя ее составляющие и связи между ними Уметь осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода Методы силового поля ПК-1.1 Выбирает экспериментальные и расчетнотеоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Владеть экспериментальными и расчетнотеоретическием методыми решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Знать основы планирования и методы решения научно-исследовательских задач в вы-бранной области химии Уметь составлять общий план исследования и устный опрос ПК-3.1 Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения результатов НИР и Устный опрос Нет		пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектирует процессы
ПК-1.1 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Внать основы планирования и методы решения научно-исследовательских задач в вы-бранной области химии Уметь составлять общий план исследования и устный опрос ПК-3.1 Определяет возможные направления развития работ и перспективы даватия развития работ и перспективы практического применения результатов НИР и Методы силового поля Методы силового поля Владеть экспериментальными и расчетно-теоретическими методыми и расчетно-теоретическими методами решения и методы решения научно-исследовательских задач в вы-бранной области химии Уметь составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий Знать методы оценки перспектив и практического применения результатов НИР и Устный опрос Нет		системы, выявляя ее составляющие и связи
ПК-1.1 Выбирает экспериментальные и расчетно- теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Владеть экспериментальными и расчетно- теоретическими методами решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Знать основы планирования и методы решения научно-исследовательских задач в вы-бранной области химии Уметь составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий ПК-3.1 Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения результатов НИР и Устный опрос Нет		проблемных ситуаций на основе системного
экспериментальные и расчетно- теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Владеть экспериментальными и расчетно- теоретическием методами решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов Знать основы планирования и методы решения научно-исследовательских задач в вы-бранной области химии Устный опрос Нет ПК-3.1 Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения результатов НИР и Знать методы оценки перспектив и практического применения результатов НИР и Устный опрос Нет	силового поля	Методы силового поля
научно-исследовательских задач в вы-бранной области химии Уметь составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий ПК-3.1 Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения результатов НИР и В торитического применения результатов НИР и Остный опрос Нет	ения имеющихся Устный опрос Да Нет	экспериментальные и расчетно- теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
Детальные планы отдельных стадий Устный опрос да ПК-3.1 Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения результатов НИР и Устный опрос Нет		научно-исследовательских задач в вы-бранной
возможные направления развития работ и перспективы практического применения результатов НИР и Устный опрос Нет	I ACTHRIN DUDOC I 119 I HEL	l ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' '
применения полученных результатов НИОКР в выбранной области химии	/льтатов НИР и Устный опрос Нет Да	возможные направления развития работ и перспективы практического применения ними полученных В нать методы оценки перспектив и практического применения результатов НИР и НИОКР в выбранной области химии
Владеть навыками определения возможных направлений развития работ в выбранной Устный опрос Да области химии		направлений развития работ в выбранной
Уметь систематизировать и анализировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР. Устный опрос Да		

ПК-8.3 Использует теоретические представления для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул	Уметь планировать стратегию решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	Устный опрос	Да	Нет
	Знать основные методы решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	Устный опрос	Нет	Да
	Владеть теоретическими представлениями для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул	Устный опрос	Да	Нет
ПК-8.4 Использует знания о типовых экспериментальных и расчётных методах органической химии для планирования и реализации задач исследования органических молекул	Уметь планировать стратегию решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	Устный опрос	Да	Нет
	Знать основные методы решения задач по определению структуры, идентификации и исследованию реакционной способности органических соединений	Устный опрос	Нет	Да
	Владеть теоретическими представлениями для прогноза и последующей интерпретации свойств различных систем, исходя из их состава, строения, пространственных структур молекул	Устный опрос	Да	Нет
УК-1.2 Определяет пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектирует процессы по их устранению	Владеть навыками выработки стратегии действий по преодолению проблемной ситуации	Устный опрос	Да	Нет
	Знать способы анализа проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними	Устный опрос	Нет	Да
	Уметь осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода	Устный опрос	Да	Нет

Примерные задания для самостоятельной работы.

- 1. Изображение стереоизомеров и конформеров соединения предложенной структуры. Построение Z-матрицы соединений, предложенных преподавателем (пропан, циклопентан, ацетон, уксусная кислота, глицин и др.).
- 2. Изображение схемы механизма реакции: бимолекулярное нуклеофильное замещение, элиминирование, мономолекулярное нуклеофильное замещение, электрофильное замещение в ароматическом ряду, электрофильное присоединение, присоединение-отщепление по карбонильной группе и др.
- 3. Расчёт геометрии и электронной структуры простых молекул с помощью программы GAMESS.
- 4. Расчет энергии активации простых реакций с помощью программы GAMESS. Расчёт геометрии молекул методом молекулярной механики с помощью программы Avogadro.

Шкала и процедура оценивания сформированности компетенций

На этапе текущей аттестации по результатам тестирования и сдачи отчетов по лабораторным работам оценивается уровень достижения каждого из запланированных результатов обучения — дескрипторов (знаний, умений, владений) в соответствии со шкалами и критериями, установленными картами компетенций ОПОП (Приложение 1 ОПОП). При достижении уровня сформированности заявленных дескрипторов компетенций более 75% студент получает допуск к экзамену.

На этапе промежуточной аттестации используется система оценки успеваемости обучающихся, которая позволяет преподавателю оценить уровень освоения материала обучающимися. Критерии оценивания сформированности планируемых результатов обучения (дескрипторов) представлены в карте компетенции ОПОП.

Форма оценки знаний: для зачета — «зачет/незачет»; для экзамена: оценка - 5 «отлично»; 4 «хорошо»; 3 «удовлетворительно»; 2 «неудовлетворительно». Лабораторные работы оцениваются по системе «зачет/незачет», задания для практических занятий - «зачет/незачет».

Шкала оценивания:

«Зачет» — выставляется, если сформированность заявленных дескрипторов компетенций более 75%, при этом обучающийся показывает хорошие знания изученного учебного материала; самостоятельно, логично и последовательно излагает и интерпретирует материалы учебного курса; полностью раскрывает смысл предлагаемого вопроса; владеет основными терминами и понятиями изученного курса; показывает умение переложить теоретические знания на предполагаемый практический опыт.

«Отлично» — выставляется, если сформированность заявленных дескрипторов компетенций 80% и более (в соответствии с картами компетенций ОПОП) оценивается критериями «хорошо» и «отлично», при условии отсутствия оценки «неудовлетворительно»: студент показал прочные знания основных положений фактического материала, умение самостоятельно решать конкретные практические задачи повышенной сложности, свободно использовать справочную литературу, делать обоснованные выводы из результатов анализа конкретных ситуаций;

«Хорошо» — выставляется, если сформированность заявленных дескрипторов компетенций на 60% и более (в соответствии с картами компетенций ОПОП) оценивается критериями «хорошо» и «отлично», при условии отсутствия оценки «неудовлетворительно», допускается оценка «удовлетворительно»: обучающийся показал прочные знания основных положений фактического материала, умение самостоятельно решать конкретные практические задачи, предусмотренные рабочей программой, ориентироваться в рекомендованной справочной литературе, умеет правильно оценить полученные результаты анализа конкретных ситуаций;

«Удовлетворительно» — выставляется, если сформированность заявленных дескрипторов компетенций 40% и более (в соответствии с картами компетенций ОПОП) оценивается критериями «удовлетворительно», «хорошо» и «отлично»: обучающийся показал знание основных положений фактического материала, умение получить с помощью преподавателя правильное решение конкретной практической задачи из числа предусмотренных рабочей программой, знакомство с рекомендованной справочной литературой;

«Неудовлетворительно» — выставляется, если сформированность заявленных дескрипторов компетенций менее чем 40% (в соответствии с картами компетенций ОПОП) оценивается критериями «удовлетворительно», «хорошо» и «отлично»: при ответе обучающегося выявились существенные пробелы в знаниях основных положений фактического материала, неумение с помощью преподавателя получить правильное решение конкретной практической задачи из числа предусмотренных рабочей программой учебной дисциплины.

Соответствие критериев оценивания сформированности планируемых результатов обучения (дескрипторов) системам оценок представлено в табл. 4

Таблица 4

Интегральная оценка

Критерии	Традиционная оценка	Балльно-рейтинговая оценка
5	5	86 - 100
4	4	61-85
3	3	51-60
2 и 1	2	0-50

Обучающиеся обязаны сдавать все задания в сроки, установленные преподавателем. Оценка «Удовлетворительно» по дисциплине может выставляться и при неполной сформированности компетенций в ходе освоения отдельной учебной дисциплины, если их формирование предполагается продолжить на более поздних этапах обучения, в ходе изучения других учебных дисциплин.