

Специальность / Speciality: 6-05-0531-04 Химия (научно-педагогическая деятельность) / 6-05-0531-04 Chemistry (scientific and pedagogical activity)

Учебная дисциплина, модуль / Academic discipline, module: Методы компьютерного моделирования в химическом образовании / Computer modeling methods in chemical education

Краткое содержание учебной дисциплины, модуля / Brief summary	Учебная программа по учебной дисциплине «Методы компьютерного моделирования в химическом образовании» разработана в соответствии с учебным планом по специальности 6-05-0531-04 Химия (научно-педагогическая деятельность). Дисциплина «Методы компьютерного моделирования в химическом образовании» представляется введением в современные цифровые методы преподавания, включающие использования новейших программных решений для молекулярного моделирования с целью визуализирования и представления химической информации. Дисциплина опирается на знание студентами основ общей, неорганической и органической химии в объеме, предусмотренном программой высшего образования	The curriculum for the course "Methods of Computer Modeling in Chemical Education" is developed in accordance with the curriculum for the specialty 6-05-0531-04 Chemistry (scientific and pedagogical activity). The course "Methods of Computer Modeling in Chemical Education" is an introduction to modern digital teaching methods, including the use of the latest software solutions for molecular modeling for the purpose of visualizing and presenting chemical information. The course is based on students' knowledge of the fundamentals of general, inorganic, and organic chemistry to the extent provided by the higher education program..
Формируемые компетенции / The formed competences	Освоение учебной дисциплины «Методы компьютерного моделирования в химическом образовании»	Mastering the course "Methods of Computer Modeling in Chemical Education" should ensure the development of the fol-

	должно обеспечить формирование следующей универсальные компетенции: УК-2 – Решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе применения информационно-коммуникационных технологий.	lowing universal competencies: UC-2 – Solve standard professional tasks using information and communication technologies.
Результаты обучения (знать, уметь, владеть) / Learning outcomes (know, can, be able)	В результате изучения учебной дисциплины студент должен знать: – основные понятия, принципы и теоретические основы молекулярного моделирования в химии; – классификацию и особенности применения основных методов молекулярного моделирования (молекулярной механики, квантовой химии, молекулярной динамики); – возможности и ограничения современных программных пакетов для компьютерного моделирования химических систем; – подходы к визуализации и анализу трехмерных молекулярных структур; – методы интерпретации результатов вычислительных экспериментов (геометрия молекул, энергетические параметры, электронные свойства, реакционные пути); – правила безопасной и этичной	Upon completion of this course, students should understand: - the basic concepts, principles, and theoretical foundations of molecular modeling in chemistry; - the classification and application features of the main methods of molecular modeling (molecular mechanics, quantum chemistry, molecular dynamics); - the capabilities and limitations of modern software packages for computer modeling of chemical systems; - approaches to visualizing and analyzing three-dimensional molecular structures; - methods for interpreting the results of computational experiments (molecular geometry, energy parameters, electronic properties, reaction pathways); – rules for safe and ethical work with software and digital data in educational and research activities. Be able to: – select an appropriate molecular modeling method depending on the chemical problem

	работы с программным обеспечением и цифровыми данными в образовательной и исследовательской деятельности. уметь: – выбирать адекватный метод молекулярного моделирования в зависимости от поставленной химической задачи; – строить и оптимизировать молекулярные структуры с использованием специализированного программного обеспечения; – проводить расчеты физико-химических и структурных характеристик органических и неорганических соединений; – визуализировать и интерпретировать результаты моделирования для объяснения свойств веществ и механизмов реакций; – интегрировать данные молекулярного моделирования в учебные и исследовательские проекты по химии. владеть: – навыками работы с современными программными средствами молекулярного моделирования (например, Avogadro, Gaussian, Chem3D, VMD и др.); – методами подготовки, оформле-	at hand; – construct and optimize molecular structures using specialized software; – calculate the physicochemical and structural characteristics of organic and inorganic compounds; – visualize and interpret modeling results to explain the properties of substances and reaction mechanisms; – integrate molecular modeling data into educational and research projects in chemistry. Possess: – skills in working with modern molecular modeling software (e.g., Avogadro, Gaussian, Chem3D, VMD, etc.); – methods for preparing, presenting, and formatting the results of computer experiments; – techniques for critically analyzing and comparing theoretical data with experimental results; – basic digital literacy competencies in the context of using computational methods in chemistry education.
--	---	---

	ния и представления результатов компьютерных экспериментов; – приемами критического анализа и сопоставления теоретических данных с экспериментальными результатами; – базовыми компетенциями цифровой грамотности в контексте использования вычислительных методов в химическом образовании.	
Семестр изучения учебной дисциплины, модуля / Semester of study	4	4
Пререквизиты / Prerequisites	Общая, неорганическая и органическая химия	General and inorganic chemistry
Трудоемкость в зачетных единицах (кредитах) / Credit units	3	3
Количество аудиторных часов и часов самостоятельной работы / Academic hour of students' class work, hours of self-directed learning	34/56	34/56
Требования и формы текущей и промежуточной аттестации / Requirements and forms of current and interim certification	Зачёт (устная форма)	End-of-term test (oral form)