

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Аксёнов Александр Викторович
Должность: Декан химического факультета
Дата подписания: 19.06.2026 12:07:07
Уникальный программный ключ:
0736357872-4421481433ac4a108942c74834

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ** Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета
д.х.н., проф. Аксенов А.В.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
«Компьютерное моделирование неорганических материалов»

Направление подготовки
Направленность (профиль)

Форма обучения
Год начала обучения
Реализуется в семестре

04.04.01 Химия
Химия современных материалов и технологий
очная
2026
1

Разработано
И. о. зав. кафедрой, доцент каф.
неорганической химии, к.х.н.
Чебышев Константин Александрович
Ассистент каф. неорганической химии, к.х.н.
Бережная Татьяна Сергеевна
Ассистент каф. неорганической химии,
Щеглов Николай Евгеньевич

1. Цель и задачи освоения дисциплины (модуля)

- формирование компетенций в области компьютерного моделирования и теоретического анализа структуры, свойств и процессов формирования неорганических материалов с использованием современных методов вычислительной химии и материаловедения.

- фундаментальная подготовка студента по дисциплине позволит осуществлять прогнозирование свойств и создание перспективных материалов для новой техники, что позволит успешно работать как в России, так и за рубежом, заниматься научно-исследовательской, образовательной или методической деятельностью. Данные навыки обеспечат социальную и академическую мобильность студента, востребованность на рынке труда, успешную карьеру, а также подготовят его к работе в условиях реальной экономики и существующей правовой системы.

- развитие активного химического мышления на основе системного подхода и современных достижений химии, формирование у студентов научного мировоззрения, понимание основ строения и кристаллической структуры соединений, привитие навыков анализа химического эксперимента с помощью современных методов вычислительной химии и материаловедения.

В задачи программы подготовки входит

- одной из задач курса является освоение методов компьютерного моделирования материалов, а именно применение квантово-механических методов для расчёта электронной структуры неорганических материалов.

- обучение анализу структуры и свойств неорганических материалов; исследование устойчивости и термодинамических характеристик материалов.

- научиться представлять интегрировать компьютерное моделирование в экспериментальные исследования; сравнивать теоретические предсказания с экспериментальными данными; оптимизировать экспериментальные условия на основе вычислительных предсказаний.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений Б1.В.03. Её освоение происходит в 1 семестре.

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

Код, формулировка компетенции	Код, формулировка индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций, индикаторов
УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни.	ИД-1 УК-6 Устанавливает личные и профессиональные цели в соответствии с уровнем своих ресурсов и приоритетов действий, для успешного развития в избранной сфере профессиональной деятельности ИД-2 УК-6 Реализует и корректирует стратегию личностного и профессионального	Умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Владеет навыками самоорганизации и саморазвития.

	развития, с учетом условий, средств, личностных возможностей, этапов карьерного роста, временной перспективы развития деятельности и требований рынка труда ИД-3 УК-6 Критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач в избранной сфере профессиональной деятельности.	
ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ИД-1 ПК-1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР ИД-2 ПК-1 Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИР ИД-3 ПК-1. Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР ИД-4 ПК-1. Готовит объекты исследования	Знает концепции основных разделов современной химической науки. Знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Знает правовые, экономические и профессиональные нормы и обязанности. Знает технологические требования и нормативы. Умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Умеет работать в команде. Владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии. Владеет навыками решения химических задач. Владеет методами оформления результатов деятельности в изобразительной предметной области. Владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях. Владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовки научных текстов.

ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ИД-1 ПК-2. Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных)	Знает концепции основных разделов современной химической науки. Знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Знает правовые, экономические и профессиональные нормы и обязанности. Знает технологические требования и нормативы. Знает информационные основы методов анализа экспериментальных данных. Умеет работать с источниками научно-технической информации, научной литературы, баз данных в области фундаментальной и прикладной химии, составлять готовый информационный продукт в области профессиональной деятельности. Умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Умеет работать в команде. Владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии. Владеет навыками решения химических задач. Владеет методами оформления результатов деятельности в избранной предметной области. Владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях. Владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовка научных текстов.
ПК-3 Владеет базовыми навыками	ИД-1 ПК-3. Выполняет стандартные операции на	Знает концепции основных разделов современной

использования современной аппаратуры в профессиональной деятельности.	высокотехнологическом современном оборудовании. ИД-2 ПК-3. Обосновывает применение того или иного алгоритма машинного обучения для решения конкретной профессиональной задачи химической направленности. ИД-3 ПК-3. Разрабатывает и адаптирует оригинальные модели и алгоритмы для работы искусственного интеллекта при решении профессиональных задач химической направленности.	химической науки. Знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Знает правовые, экономические и профессиональные нормы и обязанности. Знает технологические требования и нормативы. Умеет применять цифровые инструменты при планировании научных исследований в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Владеет основными методами исследований, сбора и анализа исходных данных для различных областей химии. Владеет навыками применения цифровых навыков при решения химических задач. Владеет методами оформления результатов деятельности в избранной предметной области. Владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях. Владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовки научных текстов. Владение методами направленными на интегрирование элементов Big Data, IoT, Блокчейн в процесс с целью повышения адекватности математических моделей.
--	---	---

4. Объем учебной дисциплины (модуля) и формы контроля

Объем занятий: всего: 3 з.е. 108 акад.ч.	ОФО, в акад. Часах
Контактная работа:	
Лекции/ из них практическая подготовка	18/0
Лабораторные работы/из них практическая	0

подготовка	
Практические занятия/из них практическая подготовка	18/4
Самостоятельная работа	72
Формы контроля	
Экзамен	-
Зачет	-
Зачет с оценкой	1 семестр
Курсовая работа	нет

**5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)
с указанием количества часов и видов занятий**

№	Раздел (тема) дисциплины и краткое содержание	Формируемы е компетенции , индикаторы	Очная форма			Самостоятельна я работа	Формы текущего контроля успеваемости
			Контактная работа обучающихся с преподавателем / из них в форме практической подготовки, часов				
			Лекци и	Практически е занятия	Лабораторны е работы		
1	Тема 1: Введение в теорию моделирования. Построение модели. Этапы моделирования. Введение в курс. Понятие модели. Классификация методов моделирования. Объект и его модель.	ИД-1 УК-1 ИД-2 УК-1 ИД-1 ПК-1 ИД-3 ПК-1	2/0	2/0	-	8	Собеседовани е
2	Тема 2: Алгоритмы геометрического моделирования. Математические и компьютерные методы моделирования. Характеристика моделей СМО. Формулы Литта.	ИД-3 ПК-1 ИД-4 ПК-1 ИД-1 ПК-4 ИД-2 ПК-4	2/0	2/0	-	8	Тестирование
3	Тема 3: Методы стохастического и имитационного моделирования. Примеры построения и использования компьютерных моделей. Получение последовательностей с заданным распределением.	ИД-1 ПК-2 ИД-2 ПК-5 ИД-3 ПК-5 ИД-4 ПК-5	2/0	2/0	-	8	Защита реферата
4	Тема 4: Статистические характеристики стохастических и имитационных моделей. Методы статистического моделирования. Методы и средства имитационного моделирования. Генерация случайных и псевдослучайных	ИД-1 УК-6 ИД-2 УК-6 ИД-3 ПК-6 ИД-3 ПК-1	2/0	2/0	-	8	Коллоквиум

	последовательности.						
5	Тема 5: Метод Монте-Карло. Метод Монте-Карло и его применение.	ИД-1 ПК-7 ИД-2 ПК-7 ИД-1 ПК-6 ИД-2 ПК-6	2/0	2/1	-	8	Собеседование
6	Тема 6: Алгоритмизация задач с помощью метода Монте-Карло. Метод Монте-Карло.	ИД-1 УК-1 ИД-2 УК-6 ИД-1 ПК-4 ИД-3 ПК-5	2/0	2/1	-	8	Тестирование
7	Тема 7: Моделирование в химии. Виды и примеры моделей в химии. Структурные и кинетические модели в химии.	ИД-1 УК-6 ИД-2 ПК-1 ИД-1 ПК-4 ИД-3 ПК-4	2/0	2/1	-	8	Тестирование
8	Тема 8: Информационное моделирование. Понятие информационного моделирования. Особенности построения информационных моделей.	ИД-1 УК-1 ИД-2 УК-6 ИД-1 ПК-2 ИД-3 ПК-5	2/0	2/1	-	8	Собеседование
9	Тема 9: Генерация псевдослучайных последовательностей. Цикличность процессов моделирования.	ИД-1 ПК-6 ИД-2 ПК-6 ИД-1 ПК-7 ИД-3 ПК-7	2/0	2/0	-	8	Коллоквиум
	ИТОГО за 1 семестр		18/0	18/4	-	72	
	ИТОГО		18/0	18/4	-	72	

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине Физические методы исследования базируется на перечне осваиваемых компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения дисциплины. ФОС обеспечивает объективный контроль достижения запланированных результатов обучения. ФОС включает в себя:

- описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания;
- методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций;
- типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений и уровня овладения формируемыми компетенциями в процессе освоения дисциплины (модуля).

ФОС является приложением к данной программе дисциплины (модуля).

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Приступая к работе, каждый студент должен принимать во внимание следующие положения.

Дисциплина построена по тематическому принципу, каждая тема представляет собой логически завершённый раздел.

Лекционный материал посвящён рассмотрению ключевых, базовых положений курсов и разъяснению учебных заданий, выносимых на самостоятельную работу студентов.

Практические занятия проводятся с целью закрепления усвоенной информации, приобретения навыков ее применения при решении практических задач в соответствующей предметной области.

Самостоятельная работа студентов направлена на самостоятельное изучение дополнительного материала, подготовку к практическим и лабораторным занятиям, а также выполнения всех видов самостоятельной работы.

Для успешного освоения дисциплины, необходимо выполнить все виды самостоятельной работы, используя рекомендуемые источники информации.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

8.1.1. Перечень основной литературы:

1. W. J. Hehre, R. F. Stewart, and J. A. Pople, J. Am. Chem. Phys., 51, 2657 (1969); J. B. Collins, P. V. Schleyer, J. S. Binkley, and J. A. Pople, J. Chem. Phys., 64, 5142 (1976); R. F. Stewart, J. Chem. Phys., 52, 431 (1970).
2. J. S. Binkley, J. A. Pople, and W. J. Hehre, J. Am. Chem. Soc., 102, 939 (1980); M. S. Gordon, J. S. Binkley, J. A. Pople, W. J. Pietro, and W. J. Hehre, J. Am. Chem. Soc., 104, 2797 (1982); W. J. Pietro, M. M. Francl, W. J. Hehre, D. J. Defrees, J. A. Pople, and J. S. Binkley, J. Am. Chem. Soc., 104, 5039 (1982).
3. W. J. Hehre, R. Ditchfield, and J. A. Pople, J. Chem. Phys., 56, 2257 (1972); P. C. Hariharan and J. A. Pople, Theor. Chim. Acta, 28, 213 (1973); M. S. Gordon, J. Am. Chem. Phys. Lett., 76, 163 (1980).

8.1.2 Перечень дополнительной литературы:

1. Т. Н. Дunning and P. J. Hay, in Modern Theoretical Chemistry, Plenum, New York, 1976.
2. Кларк, Т. Компьютерная химия / Т. Кларк. — М. : Мир, 1990.

3. Соловьев, М. Е. Компьютерная химия / М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. — М. : СЛОН-Пресс, 2005.

8.2. Перечень учебно-методического обеспечения самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

1. Сбоник задач по курсу: «Компьютерный дизайн материалов» / Б.Н. Галимзянов, Г.А. Никифоров. – Казань: Казан. Ун-т, 2022. – 36 с.

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

1. <http://www.koob.ru> – электронная библиотека.
2. <http://www.iqlib.ru> – Электронно-библиотечная система.
3. <http://studentam.net> – электронная библиотека учебников.
4. <http://www.xumuk.ru>
5. <http://www.chemport.ru>
6. <https://poznayka.org>
7. <https://studfiles.net>

9. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

При чтении лекций используется компьютерная техника, демонстрации презентационных мультимедийных материалов. На семинарских и практических занятиях студенты представляют презентации, подготовленные ими в часы самостоятельной работы.

Информационно-справочные и информационно-правовые системы, используемые при изучении дисциплины:

1	https://studbooks.net
2	https://chem21.info
3	https://studme.org/

Программное обеспечение:

1	Альт Рабочая станция 10
2	Альт Рабочая станция К
3	Альт «Сервер»
4	Пакет офисных программ - Р7-Офис

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

Лекционные занятия	Учебная аудитория для проведения учебных занятий, оснащенная мультимедийным оборудованием и техническими средствами обучения.
Практические занятия	Учебная аудитория для проведения занятий, оснащённая мультимедийным оборудованием и техническими средствами.
Самостоятельная работа	Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащенное компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и возможностью доступа к электронной информационно-образовательной среде университета
Практическая подготовка	Осуществляется в структурных подразделениях университета и(или)в организациях, осуществляющих деятельность по профилю соответствующей образовательной программы, в том числе ее структурном подразделении

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, оснащены оборудованием и техническими средствами обучения. Помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа к электронной информационно-образовательной среде. Специализированная мебель и технические средства обучения, служащие для представления учебной информации.

Материально-техническая база обеспечивает проведение всех видов дисциплинарной и междисциплинарной подготовки, практической, научно-исследовательской работы обучающихся (переносной ноутбук, переносной проектор, компьютеры с необходимым программным обеспечением и выходом в интернет).

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду образовательной организации.

11. Особенности освоения дисциплины (модуля) лицами с ограниченными возможностями здоровья

Обучающимся с ограниченными возможностями здоровья предоставляются специальные учебники, учебные пособия и дидактические материалы, специальные технические средства обучения коллективного и индивидуального пользования, услуги ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь, а также услуги сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков.

Освоение дисциплины (модуля) обучающимися с ограниченными возможностями здоровья может быть организовано совместно с другими обучающимися, а также в отдельных группах.

Освоение дисциплины (модуля) обучающимися с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья.

В целях доступности получения высшего образования по образовательной программе лицами с ограниченными возможностями здоровья при освоении дисциплины (модуля) обеспечивается:

1) для лиц с ограниченными возможностями здоровья по зрению:

- присутствие ассистента, оказывающий студенту необходимую техническую помощь с учетом индивидуальных особенностей (помогает занять рабочее место, передвигаться, прочесть и оформить задание, в том числе, записывая под диктовку),

- письменные задания, а также инструкции о порядке их выполнения оформляются увеличенным шрифтом,

- специальные учебники, учебные пособия и дидактические материалы (имеющие крупный шрифт или аудиофайлы),

- индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс,

- при необходимости студенту для выполнения задания предоставляется увеличивающее устройство;

2) для лиц с ограниченными возможностями здоровья по слуху:

- присутствие ассистента, оказывающий студенту необходимую техническую помощь с учетом индивидуальных особенностей (помогает занять рабочее место, передвигаться, прочесть и оформить задание, в том числе, записывая под диктовку),

- обеспечивается наличие звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования, при необходимости обучающемуся предоставляется звукоусиливающая аппаратура индивидуального пользования;

- обеспечивается надлежащими звуковыми средствами воспроизведения информации;

3) для лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата (в том числе с тяжелыми нарушениями двигательных функций верхних конечностей или отсутствием верхних конечностей):

- письменные задания выполняются на компьютере со специализированным программным обеспечением или надиктовываются ассистенту;
- по желанию студента задания могут выполняться в устной форме.

12. Особенности реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения

Согласно части 1 статьи 16 Федерального закона от 29 декабря 2012 г. № 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации» под *электронным обучением* понимается организация образовательной деятельности с применением содержащейся в базах данных и используемой при реализации образовательных программ информации и обеспечивающих ее обработку информационных технологий, технических средств, а также информационно-телекоммуникационных сетей, обеспечивающих передачу по линиям связи указанной информации, взаимодействие обучающихся и педагогических работников. Под *дистанционными образовательными технологиями* понимаются образовательные технологии, реализуемые в основном с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) взаимодействии обучающихся и педагогических работников.

Реализация дисциплины может быть осуществлена с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично. Компоненты УМК дисциплины (рабочая программа дисциплины, оценочные и методические материалы, формы аттестации), реализуемой с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения, содержат указание на их использование.

При организации образовательной деятельности с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения могут предусматриваться асинхронный и синхронный способы осуществления взаимодействия участников образовательных отношений посредством информационно-телекоммуникационной сети

«Интернет».

При применении дистанционных образовательных технологий и электронного обучения в расписании по дисциплине указываются: способы осуществления взаимодействия участников образовательных отношений посредством информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (ВКС-видеоконференцсвязь, ЭТ – электронное тестирование); ссылки на электронную информационно-образовательную среду СКФУ, на образовательные платформы и ресурсы иных организаций, к которым предоставляется открытый доступ через информационно-телекоммуникационную сеть «Интернет»; для синхронного обучения - время проведения онлайн-занятий и преподаватели; для асинхронного обучения - авторы онлайн-курсов.

При организации промежуточной аттестации с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения используются Методические рекомендации по применению технических средств, обеспечивающих объективность результатов при проведении промежуточной и государственной итоговой аттестации по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета и программам магистратуры с применением дистанционных образовательных технологий (Письмо Минобрнауки России от 07.12.2020 г. № МН-19/1573- АН "О направлении методических рекомендаций").

Реализация дисциплины с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий осуществляется с использованием электронной информационно-образовательной среды СКФУ, к которой обеспечен доступ обучающихся через информационно-телекоммуникационную сеть «Интернет», или с использованием ресурсов иных организаций, в том числе платформ, предоставляющих сервисы для проведения видеоконференций, онлайн-встреч и дистанционного обучения (МТС-Линк), а также с использованием возможностей социальных сетей для осуществления коммуникации обучающихся и преподавателей.

Учебно-методическое обеспечение дисциплины, реализуемой с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий, включает представленные в электронном виде рабочую программу, учебно-методические пособия или курс лекций, методические указания к выполнению различных видов учебной деятельности обучающихся, предусмотренных дисциплиной, и прочие учебно-методические материалы, размещенные в информационно-образовательной среде СКФУ.