

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор
по образовательной деятельности КФУ
Проф. Таюрский Д.А.

"__" _____ 20__ г.

Программа дисциплины

Теоретические и компьютерные методы в физической химии Б1.В.ОД.8

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Физико-химические методы исследования в химии

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Седов И.А.

Рецензент(ы):

Новиков В.Б.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Соломонов Б. Н.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__ г

Регистрационный No

Казань
2017

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) Седов И.А.

1. Цели освоения дисциплины

Формирование профессиональных компетенций в области физической химии, необходимые для реализации научно-исследовательской, производственно-технологической и педагогической деятельности. Формирование у студентов теоретической базы, необходимой для проведения научных и прикладных исследований, навыков работы с современными компьютерными программами.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ОД.8 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к обязательным дисциплинам.

Осваивается на 2 курсе, 3 семестр.

Данная учебная дисциплина включена в раздел 'Б1.В.ДВ.1.1 Дисциплины (модули)' вариативной части образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Общенаучный цикл Б1, его вариативная часть Б1.В.ДВ.1.1. Опирается на основные разделы общенаучных дисциплин: физическая химия, неорганическая химия, органическая химия, квантовая химия.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	Должен обладать способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу
ОК-1 (общекультурные компетенции)	Должен обладать способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу
ОК-3 (общекультурные компетенции)	Должен обладать готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОК-3 (общекультурные компетенции)	Должен обладать готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	Должен обладать способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	Должен обладать способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-3 (профессиональные компетенции)	Должен обладать владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-3 (профессиональные компетенции)	Должен обладать владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации
ПК-2 (профессиональные компетенции)	Должен обладать владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии
ПК-2 (профессиональные компетенции)	Должен обладать владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии

В результате освоения дисциплины студент:

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания в различных областях химии и химической технологии

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) 144 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен в 3 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Обзор фундаментальных принципов физической химии	3	1	2	2	0	контрольная работа устный опрос
2.	Тема 2. Основные принципы и методы квантовой химии	3	2	2	0	0	устный опрос
3.	Тема 3. Основные понятия статистической термодинамики	3	3	2	0	0	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
4.	Тема 4. Теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии	3	4	2	0	0	устный опрос
5.	Тема 5. Методы расчета макроскопических свойств веществ	3	5	2	0	0	проверка практических навыков устный опрос
6.	Тема 6. Компьютерные программы для визуализации молекул. Форматы файлов данных о химических структурах.	3	6	2	2	0	устный опрос
7.	Тема 7. Работа с математическими пакетами в химии	3	7	2	2	0	проверка практических навыков устный опрос
8.	Тема 8. Компьютерные методы расчета свойств отдельных молекул.	3	8	2	2	0	проверка практических навыков устный опрос
9.	Тема 9. Компьютерные методы расчета свойств систем из множества молекул	3	9	2	2	0	проверка практических навыков устный опрос
10.	Тема 10. Работа с онлайн-овыми и оффлайн-овыми базами данных	3	10	0	2	0	проверка практических навыков устный опрос
11.	Тема 11. Работа с литературными источниками информации	3	11	0	2	0	проверка практических навыков устный опрос
12.	Тема 12. Сопряжение объектов автоматизации с компьютером. Аналого-цифровое и цифро-аналоговое преобразование.	3	12	2	0	0	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
13.	Тема 13. Форматы и обработка экспериментальных данных наиболее распространенных физико-химических методов	3	13	2	2	0	проверка практических навыков устный опрос
14.	Тема 14. Статистическая обработка результатов измерений	3	14	2	2	0	проверка практических навыков устный опрос
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	экзамен
	Итого			24	18	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Обзор фундаментальных принципов физической химии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Уравнения состояния идеального газа. Три начала термодинамики. Фазовые переходы, правило фаз и диаграммы состояния. Основы химической кинетики, кинетические уравнения.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Решение задач по основным разделам химической термодинамики и кинетики

Тема 2. Основные принципы и методы квантовой химии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Волновая функция и ее свойства. Уравнение Шредингера. Решения уравнения Шредингера для простейших модельных объектов (частица в ящике, жесткий ротатор, гармонический осциллятор. Атом водорода и его орбитали. Системы из многих частиц. Принцип Паули, бозоны и фермионы. Прикладные задачи квантовой химии.

Тема 3. Основные понятия статистической термодинамики

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Микроканонический ансамбль. Эргодическая гипотеза. Канонический ансамбль и вывод распределения Больцмана. Статистическая сумма и ее связь с термодинамическими функциями. Статистический интеграл. Большой канонический ансамбль, вывод функции распределения. Поступательная, вращательная, колебательная, ядерная и электронная статистические суммы.

Тема 4. Теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Природа спектральных линий поглощения и испускания. Классификация методов спектроскопии по энергии излучения и типам переходов. Разновидности методов электронной спектроскопии. Правила отбора для электронных переходов. Колебательная спектроскопия, виды и правила отбора. Общие сведения о ЯМР-спектроскопии. Применение спектральных методов.

Тема 5. Методы расчета макроскопических свойств веществ

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Статистический интеграл для идеального газа. Потенциалы межмолекулярных взаимодействий. Неидеальные системы, конфигурационный интеграл. Модель решеточного газа. Уравнения состояния неидеальных газов. Подходы к теоретическому описанию жидкофазных систем. Методы численного моделирования.

Тема 6. Компьютерные программы для визуализации молекул. Форматы файлов данных о химических структурах.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Основные форматы хранения данных о химических формулах и структурах. Возможности химических редакторов для построения двух- и трехмерных структурных формул. Распространенные типы визуализации трехмерных структур небольших молекул и биомакромолекул.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Выполнение заданий в программах ChemOffice и HyperChem.

Тема 7. Работа с математическими пакетами в химии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Использование пакетов Mathematica, MathCAD и встроенных возможностей MS Excel для химических приложений.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Выполнение заданий в программах Mathematica и MathCAD.

Тема 8. Компьютерные методы расчета свойств отдельных молекул.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Использование квантовохимических пакетов для оптимизации геометрии и расчета свойств отдельных молекул. Сопряжение с химическими редакторами.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Расчет оптимальной геометрии, энергии и спектральных свойств заданной молекулы.

Тема 9. Компьютерные методы расчета свойств систем из множества молекул

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Программы для моделирования и технологических процессов. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Расчет свойств реального газа с заданным потенциалом межмолекулярного взаимодействия.

Тема 10. Работа с онлайн-овыми и оффлайн-овыми базами данных

практическое занятие (2 часа(ов)):

Создание и работа с оффлайн-овыми базами данных химической информации. Хранение информации о химических структурах в базах данных. Основы работы с MS Access.

Тема 11. Работа с литературными источниками информации

практическое занятие (2 часа(ов)):

Базы данных периодической химической литературы и работа с ними. Работа с базами данных о синтезах, физико-химических свойствах веществ, спектральными библиотеками. Коммерческие базы данных доступных соединений.

Тема 12. Сопряжение объектов автоматизации с компьютером. Аналого-цифровое и цифро-аналоговое преобразование.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Разложение сигнала по ортогональным функциям. Преобразование Фурье. Аналого-цифровое и цифро-аналоговое преобразование. Теорема Котельникова. Погрешности восстановления аналогового сигнала. Интерфейсы подключения к компьютеру.

Тема 13. Форматы и обработка экспериментальных данных наиболее распространенных физико-химических методов

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Основные форматы данных спектроскопических, хроматографических и калориметрических измерений. Сглаживание и экстраполяция кривых с помощью математических пакетов. Методы выделения базовой линии. Расчеты площадей и других характеристик пиков. Методы разделения пиков.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Обработка выданных хроматограммы, ЯМР-спектра и УФ-спектра.

Тема 14. Статистическая обработка результатов измерений

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Виды погрешностей. Погрешности прямых и косвенных измерений. Нормальное распределение погрешностей, доверительный интервал, доверительная вероятность. Корреляция и регрессия. Статистическая обработка результатов измерений с помощью математических и статистических пакетов.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Статистическая обработка массива данных с целью поиска многопараметровой корреляции.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Обзор фундаментальных принципов физической химии	3	1	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
				подготовка к устному опросу	2	устный опрос
2.	Тема 2. Основные принципы и методы квантовой химии	3	2	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
3.	Тема 3. Основные понятия статистической термодинамики	3	3	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
4.	Тема 4. Теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии	3	4	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
5.	Тема 5. Методы расчета макроскопических свойств веществ	3	5		4	проверка практических навыков
				подготовка к устному опросу	2	устный опрос
6.	Тема 6. Компьютерные программы для визуализации молекул. Форматы файлов данных о химических структурах.	3	6	подготовка к устному опросу	4	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
7.	Тема 7. Работа с математическими пакетами в химии	3	7		2	проверка практических навыков
				подготовка к устному опросу	2	устный опрос
8.	Тема 8. Компьютерные методы расчета свойств отдельных молекул.	3	8		2	проверка практических навыков
				подготовка к устному опросу	2	устный опрос
9.	Тема 9. Компьютерные методы расчета свойств систем из множества молекул	3	9		2	проверка практических навыков
				подготовка к устному опросу	2	устный опрос
10.	Тема 10. Работа с онлайн-овыми и оффлайн-овыми базами данных	3	10		2	проверка практических навыков
				подготовка к устному опросу	2	устный опрос
11.	Тема 11. Работа с литературными источниками информации	3	11		2	проверка практических навыков
				подготовка к устному опросу	2	устный опрос
12.	Тема 12. Сопряжение объектов автоматизации с компьютером. Аналого-цифровое и цифро-аналоговое преобразование.	3	12	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
13.	Тема 13. Форматы и обработка экспериментальных данных наиболее распространенных физико-химических методов	3	13		2	проверка практических навыков
				подготовка к устному опросу	2	устный опрос
14.	Тема 14. Статистическая обработка результатов измерений	3	14		2	проверка практических навыков
				подготовка к устному опросу	2	устный опрос
	Итого				66	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

используется балльно-рейтинговая система, выполняются практические работы на компьютерах, проводится разбор и анализ результатов расчетов для различных систем

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Обзор фундаментальных принципов физической химии

контрольная работа , примерные вопросы:

Решение задач

устный опрос , примерные вопросы:

Идеальный газ, начала термодинамики, фазовые переходы, диаграммы состояния, кинетические уравнения

Тема 2. Основные принципы и методы квантовой химии

устный опрос , примерные вопросы:

Идеальный газ, начала термодинамики, фазовые переходы, диаграммы состояния, кинетические уравнения

Тема 3. Основные понятия статистической термодинамики

устный опрос , примерные вопросы:

Микроканонический ансамбль. Эргодическая гипотеза. Канонический ансамбль и вывод распределения Больцмана. Статистическая сумма и ее связь с термодинамическими функциями. Статистический интеграл. Большой канонический ансамбль, вывод функции распределения. Поступательная, вращательная, колебательная, ядерная и электронная статистические суммы.

Тема 4. Теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии

устный опрос , примерные вопросы:

Природа спектральных линий поглощения и испускания. Классификация методов спектроскопии по энергии излучения и типам переходов. Разновидности методов электронной спектроскопии. Правила отбора для электронных переходов. Колебательная спектроскопия, виды и правила отбора. Общие сведения о ЯМР-спектроскопии. Применение спектральных методов.

Тема 5. Методы расчета макроскопических свойств веществ

проверка практических навыков , примерные вопросы:

Решение задач

устный опрос , примерные вопросы:

Статистический интеграл для идеального газа. Потенциалы межмолекулярных взаимодействий. Неидеальные системы, конфигурационный интеграл. Модель решеточного газа. Уравнения состояния неидеальных газов. Подходы к теоретическому описанию жидкофазных систем. Методы численного моделирования.

Тема 6. Компьютерные программы для визуализации молекул. Форматы файлов данных о химических структурах.

устный опрос , примерные вопросы:

Основные форматы хранения данных о химических формулах и структурах. Возможности химических редакторов для построения двух- и трехмерных структурных формул. Распространенные типы визуализации трехмерных структур небольших молекул и биомолекул.

Тема 7. Работа с математическими пакетами в химии

проверка практических навыков , примерные вопросы:

Выполнение заданий в программах Mathematica и MathCAD.

устный опрос , примерные вопросы:

Использование пакетов Mathematica, MathCAD и встроенных возможностей MS Excel для химических приложений.

Тема 8. Компьютерные методы расчета свойств отдельных молекул.

проверка практических навыков , примерные вопросы:

Расчет оптимальной геометрии, энергии и спектральных свойств заданной молекулы.

устный опрос , примерные вопросы:

Расчет оптимальной геометрии, энергии и спектральных свойств заданной молекулы.

Тема 9. Компьютерные методы расчета свойств систем из множества молекул

проверка практических навыков , примерные вопросы:

Расчет свойств реального газа с заданным потенциалом межмолекулярного взаимодействия.

устный опрос , примерные вопросы:

Программы для моделирования и технологических процессов. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло.

Тема 10. Работа с онлайн- и оффлайн- базами данных

проверка практических навыков , примерные вопросы:

Создание базы данных MS Access, содержащей 9999 структурных формул молекул.

устный опрос , примерные вопросы:

Создание и работа с оффлайн- базами данных химической информации. Хранение информации о химических структурах в базах данных. Основы работы с MS Access.

Тема 11. Работа с литературными источниками информации

проверка практических навыков , примерные вопросы:

Поиск информации о физических и химических свойствах заданного вещества.

устный опрос , примерные вопросы:

Базы данных периодической химической литературы и работа с ними. Работа с базами данных о синтезах, физико-химических свойствах веществ, спектральными библиотеками.

Коммерческие базы данных доступных соединений.

Тема 12. Сопряжение объектов автоматизации с компьютером. Аналого-цифровое и цифро-аналоговое преобразование.

устный опрос , примерные вопросы:

Разложение сигнала по ортогональным функциям. Преобразование Фурье. Аналого-цифровое и цифро-аналоговое преобразование. Теорема Котельникова. Погрешности восстановления аналогового сигнала. Интерфейсы подключения к компьютеру.

Тема 13. Форматы и обработка экспериментальных данных наиболее распространенных физико-химических методов

проверка практических навыков , примерные вопросы:

Обработка выданных хроматограмм, ЯМР-спектра и УФ-спектра.

устный опрос , примерные вопросы:

Основные форматы данных спектроскопических, хроматографических и калориметрических измерений. Сглаживание и экстраполяция кривых с помощью математических пакетов. Методы выделения базовой линии. Расчеты площадей и других характеристик пиков. Методы разделения пиков.

Тема 14. Статистическая обработка результатов измерений

проверка практических навыков , примерные вопросы:

Статистическая обработка массива данных с целью поиска многопараметровой корреляции.

устный опрос , примерные вопросы:

Виды погрешностей. Погрешности прямых и косвенных измерений. Нормальное распределение погрешностей, доверительный интервал, доверительная вероятность. Корреляция и регрессия. Статистическая обработка результатов измерений с помощью математических и статистических пакетов.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Вопросы к экзамену:

1. Три начала термодинамики и следствия из них.

2. Решения уравнения Шредингера для простейших модельных объектов
3. Решения уравнения Шредингера для атома водорода
4. Виды статистических ансамблей и их значение
5. Статистическая сумма и ее связь с термодинамическими функциями.
6. Классификация методов спектроскопии, правила отбора в различных ее видах.
7. Основные форматы хранения данных о химических формулах и структурах. основные программы для их создания и редактирования.
8. Виды потенциалов межмолекулярного взаимодействия и их учет при расчете свойств реальных систем.
9. Характеристики спектральных пиков и методы их разделения.
10. Виды погрешностей, расчет доверительных интервала и вероятности при нормальном распределении.

7.1. Основная литература:

1. Бокштейн Б.С., Менделев М.И. Физическая химия: термодинамика и кинетика. - М.:МИСИС, 2012.- 258 с. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=47443
2. Еремин В.В. Основы общей и физической химии: учебное пособие для студентов высших учебных заведений, изучающих дисциплину "Химия", по направлению подготовки ВПО 011200 / В. В. Еремин, А. Я. Борщевский. Долгопрудный: Интеллект, 2012. - 847 с.
- 3.Афанасьев, Б.Н. Физическая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2012. ? 464 с. ? Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=4312

7.2. Дополнительная литература:

1. Кларк, Т. Компьютерная химия. ? М. : Мир, 1990 .? 383 с.
2. Ермаков, Алексей Иванович. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие : для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности ВПО 020101.65 "Химия" / А. И. Ермаков .? Москва : Юрайт, 2014 .? 555 с.
- 3.Крашенинин, В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.И. Крашенинин, Газенаур Е.Г., Л.В. Кузьмина. ? Электрон. дан. ? Кемерово : Издательство КемГУ (Кемеровский государственный университет), 2012. ? 56 с. ? Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=44352 ? Загл. с экрана.
4. Стромберг, Армин Генрихович. Физическая химия : Учеб. для студ. вузов, обучающихся по хим. спец. / А.Г.Стромберг, Д.П.Семченко ; Под ред. А.Г.Стромберга .? 5-е изд., испр. ? М. : Высш. шк., 2003 .? 527 с.

7.3. Интернет-ресурсы:

- Journal of Chemical Computation and Theory - <http://pubs.acs.org/journal/jctcce>
Journal of Computational Chemistry - [http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1096-987X](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1096-987X)
База данных биологически активных молекул - www.ebi.ac.uk/chembl/db
База данных синтезов и свойств соединений - www.reaxys.com
Онлайн-редакторы химических структур molview.org - <https://www.chemaxon.com/marvin/sketch/index.php>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Теоретические и компьютерные методы в физической химии" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав. Персональный компьютер и проектор для демонстрации иллюстративного материала по всем разделам дисциплины и компьютерных симуляций

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "КнигаФонд", доступ к которой предоставлен студентам. Электронно-библиотечная система "КнигаФонд" реализует легальное хранение, распространение и защиту цифрового контента учебно-методической литературы для вузов с условием обязательного соблюдения авторских и смежных прав. КнигаФонд обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям новых ФГОС ВПО.

Оборудование для практических работ:

Персональные компьютеры

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе Физико-химические методы исследования в химии .

Автор(ы):

Седов И.А. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Новиков В.Б. _____

"__" _____ 201__ г.