

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение высшего 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

Казань
2017

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы
2. Место дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы высшего образования
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине/ модулю
 - 4.2 Содержание дисциплины
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
 - 6.1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы и форм контроля их освоения
 - 6.2 Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания
 - 6.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы
 - 6.4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
 - 7.1 Основная литература
 - 7.2 Дополнительная литература
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

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

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

Выпускник, освоивший дисциплину, должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1	способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу
ОК-3	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-1	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-2	владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации
ПК-2	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии

Выпускник, освоивший дисциплину:

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания в различных областях химии и химической технологии

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ОД.8 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Физико-химические методы исследования в химии)" и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 2 курсе, в 3 семестре.

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

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

Контактная работа - 42 часа(ов), в том числе лекции - 24 часа(ов), практические занятия - 18 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 66 часа (ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 36 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: экзамен в 3 семестре.

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

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине/ модулю

N	Раздел дисциплины/ модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Обзор фундаментальных принципов физической химии	3	2	2	0	6
2.	Тема 2. Основные принципы и методы квантовой химии	3	2	0	0	6
3.	Тема 3. Основные понятия статистической термодинамики	3	2	0	0	6
4.	Тема 4. Теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии	3	2	0	0	6
5.	Тема 5. Методы расчета макроскопических свойств веществ	3	2	0	0	6
6.	Тема 6. Компьютерные программы для визуализации молекул. Форматы файлов данных о химических структурах.	3	2	2	0	4
7.	Тема 7. Работа с математическими пакетами в химии	3	2	2	0	4
8.	Тема 8. Компьютерные методы расчета свойств отдельных молекул.	3	2	2	0	4
9.	Тема 9. Компьютерные методы расчета свойств систем из множества молекул	3	2	2	0	4

N	Раздел дисциплины/ модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
10.	Тема 10. Работа с онлайн-овыми и оффлайн-овыми базами данных	3	0	2	0	4
11.	Тема 11. Работа с литературными источниками информации	3	0	2	0	4
12.	Тема 12. Сопряжение объектов автоматизации с компьютером. Аналого-цифровое и цифро-аналоговое преобразование.	3	2	0	0	4
13.	Тема 13. Форматы и обработка экспериментальных данных наиболее распространенных физико-химических методов	3	2	2	0	4
14.	Тема 14. Статистическая обработка результатов измерений	3	2	2	0	4
	Итого		24	18	0	66

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Обзор фундаментальных принципов физической химии

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

Тема 2. Основные принципы и методы квантовой химии

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

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

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

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.

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

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

Тема 8. Компьютерные методы расчета свойств отдельных молекул.

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

Тема 9. Компьютерные методы расчета свойств систем из множества молекул

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

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

Тема 11. Работа с литературными источниками информации

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

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

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

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.

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

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утверждён приказом Министерства образования и науки Российской Федерации N1367 от 19 декабря 2013 г.).

Письмо Министерства образования Российской Федерации N14-55-996ин/15 от 27.11.2002 "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Положение N 0.1.1.67-06/265/15 от 24 декабря 2015 г. "Об организации текущего и промежуточного контроля знаний обучающихся федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Положение N 0.1.1.67-06/241/15 от 14 декабря 2015 г. "О формировании фонда оценочных средств для проведения текущей, промежуточной и итоговой аттестации обучающихся федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Положение N 0.1.1.56-06/54/11 от 26 октября 2011 г. "Об электронных образовательных ресурсах федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Регламент N 0.1.1.67-06/66/16 от 30 марта 2016 г. "Разработки, регистрации, подготовки к использованию в учебном процессе и удаления электронных образовательных ресурсов в системе электронного обучения федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Регламент N 0.1.1.67-06/11/16 от 25 января 2016 г. "О балльно-рейтинговой системе оценки знаний обучающихся в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Регламент N 0.1.1.67-06/91/13 от 21 июня 2013 г. "О порядке разработки и выпуска учебных изданий в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

6.1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы и форм контроля их освоения

Этап	Форма контроля	Оцениваемые компетенции	Темы (разделы) дисциплины
Семестр 3			
	<i>Текущий контроль</i>		

Этап	Форма контроля	Оцениваемые компетенции	Темы (разделы) дисциплины
1	устный опрос	ОК-1 , ОК-3 , ОПК-1 , ОПК-2 , ПК-2	2. Основные принципы и методы квантовой химии 3. Основные понятия статистической термодинамики 4. Теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии 5. Методы расчета макроскопических свойств веществ 6. Компьютерные программы для визуализации молекул. Форматы файлов данных о химических структурах. 7. Работа с математическими пакетами в химии 8. Компьютерные методы расчета свойств отдельных молекул. 9. Компьютерные методы расчета свойств систем из множества молекул 10. Работа с онлайн-овыми и оффлайн-овыми базами данных 11. Работа с литературными источниками информации 12. Сопряжение объектов автоматизации с компьютером. Аналого-цифровое и цифро-аналоговое преобразование. 13. Форматы и обработка экспериментальных данных наиболее распространенных физико-химических методов 14. Статистическая обработка результатов измерений
2	контрольная работа	ОК-1 , ОК-3 , ОПК-1 , ОПК-2	1. Обзор фундаментальных принципов физической химии
	Экзамен	ОК-1, ОК-3, ОПК-1, ОПК-2, ПК-2	

6.2 Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Этап	Форма контроля	Критерии оценивания			
		Отлично	Хорошо	Удовл.	Неуд.
Семестр 3					
Текущий контроль					

Этап	Форма контроля	Критерии оценивания			
		Отлично	Хорошо	Удовл.	Неуд.
1	устный опрос	В ответе качественно раскрыто содержание темы. Ответ хорошо структурирован. Прекрасно освоен понятийный аппарат. Продемонстрирован высокий уровень понимания материала. Превосходное умение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения.	Основные вопросы темы раскрыты. Структура ответа в целом адекватна теме. Хорошо освоен понятийный аппарат. Продемонстрирован хороший уровень понимания материала. Хорошее умение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения.	Тема частично раскрыта. Ответ слабо структурирован. Понятийный аппарат освоен частично. Понимание отдельных положений из материала по теме. Удовлетворительное умение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения.	Тема не раскрыта. Понятийный аппарат освоен неудовлетворительно. Понимание материала фрагментарное или отсутствует. Неумение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения.
2	контрольная работа	Правильно выполнены все задания. Продемонстрирован высокий уровень владения материалом. Проявлены превосходные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Правильно выполнена большая часть заданий. Присутствуют незначительные ошибки. Продемонстрирован хороший уровень владения материалом. Проявлены средние способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Задания выполнены более чем наполовину. Присутствуют серьезные ошибки. Продемонстрирован удовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены низкие способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Задания выполнены менее чем наполовину. Продемонстрирован неудовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены недостаточные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.

Этап	Форма контроля	Критерии оценивания			
		Отлично	Хорошо	Удовл.	Неуд.
	Экзамен	Обучающийся обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание учебно-программного материала, умение свободно выполнять задания, предусмотренные программой, усвоил основную литературу и знаком с дополнительной литературой, рекомендованной программой дисциплины, усвоил взаимосвязь основных понятий дисциплины в их значении для приобретаемой профессии, проявил творческие способности в понимании, изложении и использовании учебно-программного материала.	Обучающийся обнаружил полное знание учебно-программного материала, успешно выполнил предусмотренные программой задания, усвоил основную литературу, рекомендованную программой дисциплины, показал систематический характер знаний по дисциплине и способен к их самостоятельному пополнению и обновлению в ходе дальнейшей учебной работы и профессиональной деятельности.	Обучающийся обнаружил знание основного учебно-программного материала в объеме, необходимом для дальнейшей учебы и предстоящей работы по профессии, справился с выполнением заданий, предусмотренных программой, знаком с основной литературой, рекомендованной программой дисциплины, допустил погрешности в ответе на экзамене и при выполнении экзаменационных заданий, но обладает необходимыми знаниями для их устранения под руководством преподавателя.	Обучающийся обнаружил значительные пробелы в знаниях основного учебно-программного материала, допустил принципиальные ошибки в выполнении предусмотренных программой заданий и не способен продолжить обучение или приступить по окончании университета к профессиональной деятельности без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

6.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Семестр 3

Текущий контроль

1. Устный опрос

Тема 2 , 3 , 4 , 5 , 6 , 7 , 8 , 9 , 10 , 11 , 12 , 13 , 14

Тема 2.

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.

Тема 3.

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.

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.

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.

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.

Тема 7.

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

Тема 8.

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

Тема 9.

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

Тема 10.

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

Тема 11.

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.

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.

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.

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.

2. Контрольная работа

Тема 1

Решение задач по основным разделам химической термодинамики и кинетики.

Экзамен

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.

6.4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

В КФУ действует балльно-рейтинговая система оценки знаний обучающихся. Суммарно по дисциплине (модулю) можно получить максимум 100 баллов за семестр, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов.

Для зачёта:

56 баллов и более - "зачтено".

55 баллов и менее - "не зачтено".

Для экзамена:

86 баллов и более - "отлично".

71-85 баллов - "хорошо".

56-70 баллов - "удовлетворительно".

55 баллов и менее - "неудовлетворительно".

Этап	Форма контроля	Процедура оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	Количество баллов
Семестр 3			
Текущий контроль			
1	устный опрос	Устный опрос проводится на практических занятиях. Обучающиеся выступают с докладами, сообщениями, дополнениями, участвуют в дискуссии, отвечают на вопросы преподавателя. Оценивается уровень домашней подготовки по теме, способность системно и логично излагать материал, анализировать, формулировать собственную позицию, отвечать на дополнительные вопросы.	20
2	контрольная работа	Контрольная работа проводится в часы аудиторной работы. Обучающиеся получают задания для проверки усвоения пройденного материала. Работа выполняется в письменном виде и сдаётся преподавателю. Оцениваются владение материалом по теме работы, аналитические способности, владение методами, умения и навыки, необходимые для выполнения заданий.	30
			Всего 50
	Экзамен	Экзамен нацелен на комплексную проверку освоения дисциплины. Экзамен проводится в устной или письменной форме по билетам, в которых содержатся вопросы (задания) по всем темам курса. Обучающемуся даётся время на подготовку. Оценивается владение материалом, его системное освоение, способность применять нужные знания, навыки и умения при анализе проблемных ситуаций и решении практических заданий.	50

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

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.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

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>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

При изучении и проработке теоретического материала необходимо:

- повторить законспектированный на лекционном занятии материал и дополнить его с учетом рекомендованной по данной теме литературы;
- при самостоятельном изучении теоретической темы сделать конспект, используя рекомендованные литературные источники.
- ответить на контрольные вопросы.

Практические занятия проводятся с целью углубления и закрепления знаний, полученных на лекциях и в процессе самостоятельной работы над нормативными документами, учебной и научной литературой. При подготовке к практическому занятию необходимо:

- изучить, повторить теоретический материал по заданной теме;
- изучить материалы практикума по заданной теме, уделяя особое внимание расчетным формулам;
- при выполнении домашних расчетных заданий, изучить, повторить типовые задания, выполняемые в аудитории.

Работа с учебной и научной литературой является главной формой самостоятельной работы и необходима при подготовке к устному опросу на семинарских занятиях, к контрольным работам, тестированию, зачету. Она включает проработку лекционного материала - изучение рекомендованных источников и литературы по тематике лекций. Конспект лекции должен содержать реферативную запись основных вопросов лекции, предложенных преподавателем схем (при их демонстрации), основных источников и литературы по темам, выводы по каждому вопросу.

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

Освоение дисциплины "Теоретические и компьютерные методы в физической химии" предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. 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.

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

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.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

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