

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики



УТВЕРЖДАЮ

Проректор
по образовательной деятельности КФУ
Проф. Минзарипов Р.Г.

_____ 20__ г.

Программа дисциплины

Дополнительные главы неорганической и органической химии ФТД.Б.3

Направление подготовки: 011200.68 - Физика
Профиль подготовки: Физика сложных систем
Квалификация выпускника: магистр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский

Автор(ы):

Недопекин О.В.

Рецензент(ы):

-

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой:
Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г
Учебно-методическая комиссия Института физики:
Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No

Казань
2014

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) доцент, к.н. Недопекин О.В. Кафедра общей физики
Отделение физики, Oleg.Nedopekin@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

познакомить студентов с методами моделирования систем с химическими превращениями

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел "ФТД.Б.3 Факультативы" основной образовательной программы 011200.68 Физика и относится к базовой (общепрофессиональной) части. Осваивается на 2 курсе, 3 семестр.

факультатив

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные термохимические свойства веществ, механизмы катализа, свойства одно и многокомпонентных жидкостей, правила равновесия фаз

2. должен уметь:

прогнозировать физико-химических свойств, находить кривые фазового равновесия

3. должен владеть:

методами моделирования фазовых диаграмм, катализа на поверхности, прогнозирования физико-химических свойств веществ

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет 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. Термохимические свойства (энергетический выход реакции, энтальпия образования)	1	1-4	0	0	0	
2.	Тема 2. Катализ, механизмы катализа. Катализ на поверхности.	1	5-8	0	0	0	
3.	Тема 3. Термофизические свойства одно- и многокомпонентных жидкостей. Равновесие фаз (правило равновесия фаз Гиббса) MedeA - Gibbs	1	9-12	0	0	0	
4.	Тема 4. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR) Примеры прогнозирования физико-химических свойств органических соединений (температура кипения, критическая температура, плотность, показатель преломления) MedeA-Combi как инструмент для анализа и поиска дескрипторов на множестве соединений MedeA-PrediBond как пример QSAR соотношения bond strength <-> catalitic activity.	1	13-18	0	0	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	зачет
	Итого			0	0	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Термохимические свойства (энергетический выход реакции, энтальпия образования)

Тема 2. Катализ, механизмы катализа. Катализ на поверхности.

Тема 3. Термофизические свойства одно- и многокомпонентных жидкостей. Равновесие фаз (правило равновесия фаз Гиббса) MedeA - Gibbs

Тема 4. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR) Примеры прогнозирования физико-химических свойств органических соединений (температура кипения, критическая температура, плотность, показатель преломления) MedeA-Combi как инструмент для анализа и поиска дескрипторов на множестве соединений MedeA-PrediBond как пример QSAR соотношения bond strength <-> catalitic activity.

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

Тема 1. Термохимические свойства (энергетический выход реакции, энтальпия образования)

Тема 2. Катализ, механизмы катализа. Катализ на поверхности.

Тема 3. Термофизические свойства одно- и многокомпонентных жидкостей. Равновесие фаз (правило равновесия фаз Гиббса) MedeA - Gibbs

Тема 4. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR) Примеры прогнозирования физико-химических свойств органических соединений (температура кипения, критическая температура, плотность, показатель преломления) MedeA-Combi как инструмент для анализа и поиска дескрипторов на множестве соединений MedeA-PrediBond как пример QSAR соотношения bond strength <-> catalitic activity.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Приложение 1

7.1. Основная литература:

7.2. Дополнительная литература:

7.3. Интернет-ресурсы:

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011200.68 "Физика" и магистерской программе Физика сложных систем .

Автор(ы):

Недопекин О.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

"__" _____ 201__ г.