

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное 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

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Физико-химические методы исследования в химии

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

## Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
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 (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
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 (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) ведущий научный сотрудник, д.н. (доцент) Седов И.А. (НИЛ Лаборатория синтетических физиологически активных веществ, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Igor.Sedov@kpfu.ru

### 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

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

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания в различных областях химии и химической технологии

### 2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) 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) на 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	Разделы 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

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
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
10.	Тема 10. Работа с онлайн- и оффлайн- 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 (модуля)

### 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.

Нулевой закон термодинамики. Понятие о термометре. Температурные шкалы.

Фаза. Гомогенные и гетерогенные системы. Фазовые переходы. Виды фазовых переходов. Фазовое равновесие. Условие равновесия между фазами. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса. Фазовое равновесие в одно- и многокомпонентных системах. Правило фаз Гиббса. Фазовые диаграммы. Фазовая диаграмма воды, углекислого газа, гелия. Диаграммы плавкости.

### 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**

Газовые законы. Идеальный газ. Уравнение состояния идеального газа. Изотерма, изобара, изохора, адиабата. Уравнение Менделеева-Клапейрона. Реальные газы. Статистический интеграл для идеального газа. Потенциалы межмолекулярных взаимодействий. Неидеальные системы, конфигурационный интеграл. Модель решетчатого 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 органических соединений с различными функциональными группами. Распространенные типы визуализации трехмерных структур небольших молекул и биомолекул.

#### **Тема 7. Работа с математическими пакетами в химии**

Использование пакетов Mathematica для химических приложений. Использование пакетов MathCAD для химических приложений. Использование пакетов встроенных возможностей MS Excel для химических приложений. Особенности, преимущества и недостатки предлагаемых пакетов программ и приложений. Примеры расчета.

#### **Тема 8. Компьютерные методы расчета свойств отдельных молекул.**

Использование квантово-химических пакетов для оптимизации геометрии различных простых и сложных органических, элементоорганических и биомолекул. Теоретический расчет геометрических, электронных, термодинамических свойств отдельных молекул, содержащих разнообразные функциональные заместители. Сопряжение с химическими редакторами.

#### **Тема 9. Компьютерные методы расчета свойств систем из множества молекул**

Программы для моделирования и технологических процессов. Методы молекулярной динамики. Методы Монте-Карло. Совместное использование методов квантовой химии и молекулярной механики. Примеры использования программ моделирования структуры и свойств систем из множества молекул, возможности и ограничения.

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

Создание и работа с оффлайн-базами данных химической информации. Хранение информации о химических структурах в базах данных. Основы работы с MS Access. Работа с онлайн-базами данных, содержащими сведения о структурах и свойствах различных химических соединений: молекул, биомолекул, макросистем.

#### **Тема 11. Работа с литературными источниками информации**

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 химических соединений. Библиотечные системы данных. Возможности и ограничения. Поиск необходимой информации.

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

Разложение сигнала по ортогональным функциям. Преобразование Фурье. Аналого-цифровое преобразование и цифро-аналоговое преобразование. Теорема Котельникова. Погрешности восстановления аналогового сигнала. Интерфейсы подключения к компьютеру. Примеры использования фурье-преобразования в различных физико-химических методах.

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

Основные форматы данных спектроскопических, хроматографических и калориметрических измерений. Применение в методах спектроскопии ЯМР и ИК спектроскопии. 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 при статистической обработке данных химических и физических экспериментов. 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)**

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

#### **6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)**

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

#### **7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

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

Journal of Chemical Computation and Theory - <http://pubs.acs.org/journal/jctc>

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](http://www.ebi.ac.uk/chembl)

База данных синтезов и свойств соединений - [www.reaxys.com](http://www.reaxys.com)

Онлайн-редакторы химических структур [molview.org](http://molview.org) - <https://www.chemaxon.com/marvin/sketch/index.php>

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

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	<p>В ходе лекционных занятий следует вести конспектирование учебного материала. Необходимо обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации, положительный опыт в ораторском искусстве. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций.</p> <p>Результаты конспектирования могут быть представлены в различных формах.</p> <p>План - это схема прочитанного материала, краткий (или подробный) перечень вопросов, отражающих структуру и последовательность материала. Подробно составленный план вполне заменяет конспект.</p> <p>Конспект - это систематизированное, логичное изложение материала источника. Различаются четыре типа конспектов:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- План-конспект - это развернутый детализированный план, в котором достаточно подробные записи приводятся по тем пунктам плана, которые нуждаются в пояснении.</li> <li>- Текстуальный конспект - это воспроизведение наиболее важных положений и фактов источника.</li> <li>- Свободный конспект - это четко и кратко сформулированные (изложенные) основные положения в результате глубокого осмысливания материала. В нем могут присутствовать выписки, цитаты, тезисы; часть материала может быть представлена планом.</li> <li>- Тематический конспект - составляется на основе изучения ряда источников и дает более или менее исчерпывающий ответ по какой-то схеме (вопросу).</li> </ul>

Вид работ	Методические рекомендации
практические занятия	<p>Важной составной частью учебного процесса в университете являются практические занятия. Практические (семинарские) занятия проводятся главным образом по дисциплинам, требующим научно-теоретического обобщения литературных источников, и помогают студентам глубже усвоить учебный материал, приобрести навыки творческой работы над документами и первоисточниками.</p> <p>Планы семинарских занятий, их тематика, рекомендуемая литература, цель и задачи ее изучения сообщаются преподавателем на вводных занятиях или в методических указаниях по данной дисциплине.</p> <p>Начиная подготовку к занятию, преподаватель указывает студентам страницы в конспекте лекций, разделы учебников и учебных пособий, чтобы они получили общее представление о месте и значении темы в изучаемом курсе. Затем следуют рекомендации по работе с дополнительной литературой.</p> <p>Подготовка к практическому занятию включает 2 этапа:</p> <p>1й - организационный;</p> <p>2й - закрепление и углубление теоретических знаний.</p> <p>На первом этапе студент планирует свою самостоятельную работу, которая включает:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-уяснение задания на самостоятельную работу;</li> <li>-подбор рекомендованной литературы;</li> <li>-составление плана работы, в котором определяются основные пункты предстоящей подготовки.</li> </ul> <p>Составление плана дисциплинирует и повышает организованность в работе.</p> <p>Второй этап включает непосредственную подготовку студента к занятию. Начинать надо с изучения рекомендованной литературы. Необходимо помнить, что на лекции обычно рассматривается не весь материал, а только его часть. Остальная его часть восполняется в процессе самостоятельной работы. В связи с этим работа с рекомендованной литературой обязательна. Особое внимание при этом необходимо обратить на содержание основных положений и выводов, объяснение явлений и фактов, уяснение практического приложения рассматриваемых теоретических вопросов. В процессе этой работы студент должен стремиться понять и запомнить основные положения рассматриваемого материала, примеры, поясняющие его, а также разобраться в иллюстративном материале.</p> <p>Заканчивать подготовку следует составлением плана (конспекта) по изучаемому материалу (вопросу). Это позволяет составить концентрированное, сжатое представление по изучаемым вопросам.</p>
самостоятельная работа	<p>В процессе подготовки к занятиям при необходимости следует обращаться за консультацией к преподавателю. Идя на консультацию, необходимо хорошо продумать вопросы, которые требуют разъяснения.</p> <p>Записи имеют первостепенное значение для самостоятельной работы студентов. Они помогают понять построение изучаемого материала, выделить основные положения, проследить их логику и тем самым проникнуть в творческую лабораторию автора. Ведение записей способствует превращению чтения в активный процесс, мобилизует, наряду со зрительной, и моторную память. Следует помнить: у студента, систематически ведущего записи, создается свой индивидуальный фонд подсобных материалов для быстрого повторения прочитанного, для мобилизации накопленных знаний. Особенно важны и полезны записи тогда, когда в них находят отражение мысли, возникшие при самостоятельной работе.</p> <p>Важно развивать у студентов умение сопоставлять источники, продумывать изучаемый материал. Большое значение имеет совершенствование навыков конспектирования у студентов. Изучение дисциплины следует начинать с проработки настоящей рабочей программы, особое внимание, уделяя целям и задачам, структуре и содержанию курса.</p> <p>В ходе подготовки к занятиям необходимо изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, новыми публикациями в периодических изданиях: журналах, газетах и т.д. При этом требуется учесть рекомендации преподавателя и требования учебной программы. Студент может дополнить список использованной литературы современными источниками, не представленными в списке рекомендованной литературы, и в дальнейшем использовать собственные подготовленные учебные материалы при написании курсовых и дипломных работ.</p> <p>Студентам рекомендуется получить в Библиотечно-информационном центре университета учебную литературу по дисциплине, необходимую для эффективной работы на всех видах аудиторных занятий, а также для самостоятельной работы по изучению дисциплины.</p> <p>Успешное освоение курса предполагает активное, творческое участие студента путем планомерной, повседневной работы.</p>



Вид работ	Методические рекомендации
экзамен	<p>Экзамен как форма промежуточного контроля и организации обучения служит приемом проверки степени усвоения учебного материала и лекционных занятий, качества усвоения обучающимися отдельных разделов учебной программы, сформированных умений и навыков. Экзамен проводится в устной форме в объеме учебной программы. Преподаватель вправе задать дополнительные вопросы, помогающие выяснить степень знаний обучающегося в пределах учебного материала, вынесенного на экзамен. В период подготовки к экзамену обучающиеся вновь обращаются к пройденному учебному материалу, используя лекции и рекомендованную литературу. При этом они не только закрепляют полученные знания, но и получают новые.</p> <p>Подготовка обучающегося к экзамену включает в себя три этапа: самостоятельная работа в течение процесса обучения; непосредственная подготовка в дни, предшествующие экзамену по темам курса; подготовка к ответу на вопросы непосредственно на экзамене, на которую обучающемуся дается 30 минут с момента получения им вопросов.</p>

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

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

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

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

#### **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".

Приложение 2  
к рабочей программе дисциплины (модуля)  
Б1.В.ОД.8 Теоретические и компьютерные методы в  
физической химии

**Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Физико-химические методы исследования в химии

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

**Основная литература:**

1. Бокштейн, Б.С. Физическая химия: термодинамика и кинетика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.С. Бокштейн, М.И. Менделев, Ю.В. Похвиснев. ? Электрон. дан. ? Москва : МИСИС, 2012. ? 258 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/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. Еремин В. В. Основы общей и физической химии : учебное пособие / В.В. Еремин, А.Я. Борщевский. ? 2-е изд. испр. ? Долгопрудный : Издательский Дом 'Интеллект', 2018. ? 848 с. - ISBN 978-5-91559-250-5. - Режим доступа: <http://znanium.com/catalog/product/1022497>
4. Бутырская Е.В., Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView [Электронный ресурс] / Бутырская Е.В. - М. : СОЛОН-ПРЕСС, 2011. - 224 с. (Серия 'Библиотека студентов') - ISBN 978-5-91359-095-4 - Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785913590954.html>

**Дополнительная литература:**

1. Афанасьев, Б.Н. Физическая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. ? Электрон. дан. ? Санкт-Петербург : Лань, 2012. ? 416 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/43123>
- Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург : Лань, 2017. - 428 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92941>

*Приложение 3  
к рабочей программе дисциплины (модуля)  
Б1.В.ОД.8 Теоретические и компьютерные методы в  
физической химии*

**Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем**

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Физико-химические методы исследования в химии

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

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.