

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. Д.А. Таюрский

» _____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Электронная и пространственная структура органических соединений

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

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) профессор, д.н. (профессор) Стойков И.И. (Кафедра органической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Ivan.Stoikov@mail.ru ; профессор, д.н. (профессор) Чмутова Г.А. (Кафедра органической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Galina.Tschmutowa@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-6	способностью работать в коллективе, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОК-7	способностью к самоорганизации и самообразованию
ОПК-1	способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-3	способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности
ПК-3	владением системой фундаментальных химических понятий

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

основные положения теории стереохимии и электронной структуры органических соединений, связь между этими аспектами строения органических соединений;
 принципиальные особенности электронной структуры важнейших классов органических и элементоорганических соединений и уметь изобразить их графически;
 природу межмолекулярных взаимодействий и их возможное влияние на физические свойства и реакционную способность;
 конформационный и конфигурационный анализ органических соединений.

Должен уметь:

ориентироваться в различных гипотезах и теории конформационного анализа, в особенностях химического поведения различных типов и классов химических соединений, обусловленных их строением;
 провести полуэмпирический (неэмпирический) расчет структуры простых молекул и интермедиатов и интерпретировать полученные результаты;

Должен владеть:

навыками изображения пространственной и электронной структуры различных органических молекул.

Должен демонстрировать способность и готовность:

Уметь применять свои знания на практике

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.9 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.03.01 "Химия (не предусмотрено)" и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе в 7 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 2 зачетных(ые) единиц(ы) на 72 часа(ов).

Контактная работа - 40 часа(ов), в том числе лекции - 40 часа(ов), практические занятия - 0 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 32 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 7 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. Предмет стереохимии. Исторический фон и рождение стереохимии.	7	4	0	0	0
2.	Тема 2. Способы изображения трехмерных молекул на плоскости.	7	4	0	0	0
3.	Тема 3. Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе.	7	4	0	0	8
4.	Тема 4. Конфигурация.	7	4	0	0	0
5.	Тема 5. Конформационный анализ. Контрольная работа	7	4	0	0	8
6.	Тема 6. Современный уровень знаний об электронной структуре химических соединений, основные понятия, термины, определения.	7	2	0	0	0
7.	Тема 7. Характеристики электронной структуры химических частиц	7	4	0	0	0
8.	Тема 8. Теория возмущений в органической химии	7	4	0	0	0
9.	Тема 9. Электронная структура и межмолекулярные взаимодействия	7	4	0	0	8
10.	Тема 10. Связь между различными характеристиками пространственной и электронной структуры молекул	7	2	0	0	0
11.	Тема 11. Связь реакционной способности органических соединений с параметрами электронной и пространственной структуры	7	4	0	0	8
	Итого		40	0	0	32

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Предмет стереохимии. Исторический фон и рождение стереохимии.

Исторический фон и рождение стереохимии. Плоскополяризованный свет и его взаимодействие с веществом. Пастер и разделение виноградной кислоты на оптически активные компоненты. Изомерия молочных кислот и вывод Вислиценуса. Гипотеза Вант Гоффа и Ле Беля. Тетраэдрический атом углерода. Лестница различий молекулярных объектов. Граф как математическая модель связности молекулы, гомоморфные графы. Скалярные и векторные различия между молекулярными объектами: геометрическая изомерия, хиральность и энантиомерия. Топологически изотопные структуры, топологическая изомерия, статистическая и темплатная стратегия синтеза [n] катенанов. Неплоские графы и топологическая хиральность.

Тема 2. Способы изображения трехмерных молекул на плоскости.

Способы изображения трехмерных молекул на плоскости, летящие клинья и проекции Фишера. Система Кана-Ингольда-Прелога. R,S-номенклатура. Соединения с несколькими хиральными центрами, диастереомеры, эритро и трео-изомеры. Внутримолекулярная симметрия, мезо-формы. Псевдохиральные стереогенные центры. Описание относительной конфигурации заместителей в циклических молекулах.

Тема 3. Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе.

Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе. Хиральность. Понятие о точечных группах симметрии. Основные группы симметрии органических молекул. Ось хиральности. Плоскость хиральности. Спиральная хиральность. Особенности стереоизомерии в соединениях с пяти- и шестикоординированными центрами.

Тема 4. Конфигурация.

Энантиоочищенные, скалемические образцы и рацемические смеси. Рацемические соединения, конгломераты, твердые растворы. Определение конфигурации, гомо- и гетерохиральность, относительная и абсолютная конфигурация. Конфигурационные ряды, D- и L-, d- и l-, (+), (-) обозначения конфигураций. Определение относительной конфигурации: химическая корреляция, метод квазирацематов, эффект Коттона, аддитивный расчет оптического вращения по Брюстеру, метод Оро. Определение абсолютной конфигурации методом Бийво (анализ интенсивностей аномального рассеяния рентгеновский лучей). Представление о неэмпирических расчетах хироптических характеристик, как методе определения абсолютной конфигурации. Классификация методов контроля энантиомерного состава: интактные и дериватизирующие. Поляриметрия. Единицы количественной оценки энантиомерного состава: оптическая чистота и энантиомерный избыток. Варианты применения хроматографии и ЯМР для контроля энантиомерного состава. Дериватизирующие реагенты. Контроль энантиомерного состава.

Тема 5. Конформационный анализ. Контрольная работа

Исторические предпосылки возникновения конформационного анализа: постулат Вант Гоффа; гипотезы Бишофа и эксперимент Мидзусумы, дискуссия Байера и Заксе, выводы и доказательства Мора. Роль работ Бартона в становлении современного конформационного анализа. Б.А.Арбузов и конформационный анализ в России и в Казани. Конформеры и конформации. Методы изображения. Барьер внутреннего вращения. Механическая модель молекулы и расчеты по методу молекулярной механики.

Потенциальная поверхность, приведение многомерной поверхности к трехмерной поверхности или двумерной кривой. Топология ППЭ и колебательные уровни, безбарьерные переходы и число экспериментально различимых конформаций. Термодинамика конформационного равновесия. Распределение конформеров между конформациями. Примеры влияния внутримолекулярных взаимодействий (водородные связи, орбитальные взаимодействия) на положение конформационного равновесия. Внутреннее вращение вокруг связей C-C.

Стабильные формы циклогексанового кольца. Конформационно-гибкие формы и псевдопревращение. Параметры конформационного равновесия для циклогексана. Аксиальные и экваториальные заместители. 1,3-диаксиальные взаимодействия. Относительная стабильность стероидов и гексапираноз. Конформации четырех и пятичленных циклов. Особенности конформационного анализа циклов большого размера, влияние планарных фрагментов, трансаннулярные взаимодействия. Описание конформационных взаимоотношений в сложных случаях конформационный граф. Топные отношения групп и сторон.

Тема 6. Современный уровень знаний об электронной структуре химических соединений, основные понятия, термины, определения.

Современный уровень знаний об электронной структуре химических соединений, основные понятия, термины, определения. Общий квантовохимический подход к получению информации о структуре и реакционной способности химических соединений. Уравнение Шредингера и его модификации. Оператор энергии, его составляющие. Многоэлектронная и одноэлектронная волновые функции. Приближение МО ЛКАО. Базисные наборы. Принципиальные особенности неэмпирических и полуэмпирических расчетов. Учет эффектов электронной корреляции.

Тема 7. Характеристики электронной структуры химических частиц

Характеристики электронной структуры химических частиц : электронная энергия ; орбитальные энергии; граничные МО, их энергия, симметрия, состав, принципы изозлектронности и изолобальности; типы химических связей, их свойства; электронная и спиновая плотности, эффективные заряды на атомах ($\bar{\rho}$, $\bar{\rho}^-$); дипольный момент и поляризуемость частицы в целом, фрагментов в целом, отдельных связей, аддитивность и отклонения от аддитивности; электростатический потенциал; энергии электронных переходов, их интенсивности, характеристики электроновозбужденных состояний, отличия от структуры основного состояния. Основы теории ?Атомы в молекулах?, топологические индексы Р.Бейдера. Экспериментальные и теоретические методы изучения электронной структуры.

Тема 8. Теория возмущений в органической химии

Теория возмущений в органической химии, качественный и количественный аспекты. Понятие об одноцентровых, двухцентровых, многоцентровых возмущениях. Рабочие формулы теории возмущений для оценок орбитальных энергий. Стабилизирующие и дестабилизирующие орбитальные взаимодействия.

Молекулярно-орбитальный генезис происхождения орбиталей CH_3 , CH_2^- , CH^- органических фрагментов от МО малых молекул- AH_3 , AH_2 , AH . ?Стыковка? МО-фрагментов с образованием молекул углеводородов и их функционально замещенных производных. Природа граничных МО в важнейших классах органических соединений. Основные тенденции в изменениях энергии и состава граничных орбиталей функционально замещенных алканов, алкенов, аренов RX при варьировании ключевого атома заместителя X в пределах одной группы и одного периода таблицы Менделеева.

Тема 9. Электронная структура и межмолекулярные взаимодействия

Электронная структура и межмолекулярные взаимодействия. Неспецифические и специфические ММВ. Природа комплексов с переносом заряда и H-комплексов. Принцип ЖМКО. Возможности экспериментального изучения и теоретического описания межмолекулярных взаимодействий в настоящее время. Модели сольватации (континуальные, дискретные, комбинированные). Энергетические характеристики и параметры электронного распределения. Визуализация расчетных характеристик (программы AIM). Влияние межмолекулярных взаимодействий на реакционную способность молекул.

Тема 10. Связь между различными характеристиками пространственной и электронной структуры молекул

Связь между различными характеристиками пространственной и электронной структуры молекул

Электронная структура и геометрия жестких (квазижестких) химических частиц ? нейтральных молекул, ионов, радикалов, ион-радикалов, координационных полиэдров; неклассические (орбитальные) структуры и т.п. Концепция отталкивания валентных электронных пар, критические точки лапласиана электронной плотности, диаграммы Уолша.

Связь конформационных характеристик структурно-нежестких молекул с параметрами электронной структуры (разные виды сопряжения; сопряжение через связь и через пространство, трансаннулярные взаимодействия; эффект поля, 1,3- взаимодействия, обобщенный аномальный эффект и т.д.). Стереопределяющая роль граничных молекулярных орбиталей.

Тема 11. Связь реакционной способности органических соединений с параметрами электронной и пространственной структуры

Связь реакционной способности органических соединений с параметрами электронной и пространственной структуры Связь структура и реакционная способность, разные уровни анализа и прогнозов. Приближение изолированной молекулы и соответствующие индексы реакционной способности: эффективные заряды на атомах, электростатический потенциал, дипольный момент, поляризуемость; электронная плотность в критических точках химических связей, критические точки лапласиана электронной плотности, теория граничных орбиталей Фукуи, связь характеристик МО с окислительно-восстановительными, нуклеофильно-электрофильными свойствами соединений, регио ? и стереонаправленностью реакционных актов в основном и фотовозбужденном состояниях. Понятие о ВЗМО-, НСМО- и ОЗМО- гене.

Приближение реагирующей молекулы и соответствующие индексы реакционной способности: энергии локализации (электрофильной, нуклеофильной, радикальной) и делокализации в реакциях замещения; энергии пара- и орто- локализации в реакции Дильса-Альдера и т.п. Молекулярно-орбитальный подход, правила сохранения орбитальной симметрии Вудворда-Гоффмана для согласованных (перциклических) реакций - межмолекулярного циклоприсоединения, электроциклических реакций молекул и ионов, сигматропных перегруппировок. Объяснение с помощью правил сохранения орбитальной симметрии наиболее важных особенностей согласованных реакций (стереоспецифичность, региопредпочтительность, преимущественное направление электронного переноса и влияние на скорость реакции электронных эффектов заместителей, соотношение между активностью и селективностью реагентов, роль вторичных орбитальных взаимодействий и т.д.). Реагирование в обход симметрии.

Кинетика конформационных переходов и методы ее исследования. Конформационное равновесие и реакционная способность, уравнение Уинштейна-Холнесса, принцип Кертина-Гаммета.

Реакции, протекающие с участием нуклеофилов как активных реагентов (активность нуклеофилов и субстратов, стереохимия сближения реагентов, регионаправленность реакции - конкуренция между замещением и отщеплением, влияние растворителя, катализатора и т.д.). Реакции, протекающие с участием электрофилов : электрофильное присоединение к алкенам, электрофильное замещение в ароматическом ядре (производные бензола, пиридин, ароматические гетероциклы). Активность электрофилов и субстратов, регионаправленность реакции, структура интермедиатов (комплексов), стереохимия процесса. МО-аспект металлокомплексного катализа. Стадии одноэлектронного переноса. Металл как переключатель симметрии. Фотохимические реакции.

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)

Dr. Richard F.W. Bader. An Introduction to the Electronic Structure of Atoms and Molecules. - <http://www.chemistry.mcmaster.ca/esam/intro.html#Top>

Ruud Visser, Atoms in Molecules - http://dept.astro.lsa.umich.edu/~visserr/files/Atoms_in_Molecules.pdf

Theory of Atoms in Molecules - http://www.chemistry.mcmaster.ca/aim/aim_0.html

Материалы Химического факультета МГУ - <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/djadchenko/1.html#1>

Фотоэлектронная спектроскопия и электронная структура органических соединений. - <http://lesqm.wl.dvfu.ru/files/manuals>

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

Успешное освоение дисциплины предполагает активное, творческое участие студента путем планомерной, повседневной работы.

Общие методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельное изучение курса 'Электронная и пространственная структура органических соединений' следует начать с ознакомления с программой и требованиями к результатам изучения курса. Изучать курс рекомендуется по темам в соответствии с программой (расположение материала в программе курса не всегда совпадает с расположением его в том или ином учебнике, но соответствует тематике лекционных занятий) постепенно, в течение семестра, не оставляя на потом, на период подготовки к зачету. Не следует переходить к изучению последующей темы, пока материал предыдущей темы не усвоен. Степень освоения материала темы можно контролировать так: перед изучением темы прочесть требования к результатам ее изучения, обратив внимание на ключевые слова в требованиях к знаниям, после изучения темы проверить себя по тексту требований ('это я знаю', 'это я помню').

Работа с книгой. Изучать материал, относящийся к данной теме, следует по одному или нескольким из рекомендованных учебников (список рекомендуемой литературы приведен после плана изучения курса). Если возникают трудности при работе с основными учебниками, можно изучить соответствующую тему по конспектам лекционного курса, но затем следует обязательно вернуться к данной теме в учебнике. Для поиска необходимых сведений в учебнике можно использовать предметный указатель в конце учебника.

Большинство тем курса 'Электронная и пространственная структура органических соединений' носят теоретический характер и достаточно трудны для восприятия, поэтому тексты учебников с изложением таких тем могут вызвать определенные затруднения при их изучении. Такие тексты лучше изучать так: при первом чтении надо стараться получить общее представление об излагаемых вопросах, а также отмечать трудные и непонятные места; при повторном изучении темы необходимо усвоить все теоретические положения. Необходимо вникать в сущность того или иного изучаемого вопроса, а не пытаться лишь запомнить отдельные факты и явления. Более глубокому и прочному усвоению материала способствует изучение любого вопроса на уровне сущности, а не на уровне отдельных явлений. Изучаемый материал следует заносить в рабочую тетрадь в виде конспекта, включающего краткое последовательное изложение наиболее важной информации: новые термины, даты, имена ученых и их достижения и т.д. Во всех случаях, когда материал поддается систематизации, полезно составлять схемы и таблицы, 'свертывая' информацию в удобную, компактную форму.

Составление конспектов, особенно в форме таблиц, схем, опорных сигналов, способствует эффективному запоминанию изученного материала, поскольку здесь привлекается логическое запоминание и используется зрительный и двигательный типы памяти.

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ВЫПОЛНЕНИЮ КОНТРОЛЬНЫХ РАБОТ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

К выполнению контрольных работ рекомендуется приступать только после усвоения всего учебного материала дисциплины. Задания на контрольные работы разрабатываются в нескольких вариантах. Порядок выбора варианта задания приводится в методических указаниях по изучению данной дисциплины.

Рекомендации по освоению контрольных работ:

- контрольную работу следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю;
- ответы в контрольных работах излагать ясно, точно и полно, таким образом, чтобы преподавателю был ясен весь ход рассуждений;
- не следует переписывать в контрольные работы текст из учебников или учебных пособий;

- решения задачи работы необходимо представлять вместе со всеми промежуточными преобразованиями и ссылками на используемые справочные материалы;
- при выполнении расчётов необходимо внимательно относиться к единицам измерения всех величин, входящих в ту или иную формулу, и проверять, в каких единицах измерения должен быть результат;
- предпочтительно оформление текста и иллюстраций контрольной работы с использованием компьютера;
- допускается оформление эскизов и текста работы от руки;
- не допускаются перечёркивания, вставки, произвольное сокращение слов и каких-либо обозначений, не применяемых в литературе по изучаемой дисциплине;
- неудовлетворительное оформление контрольной работы может быть причиной её незачёта; небрежность письма и грамматические ошибки недопустимы;
- на каждой странице работы необходимо оставлять поля на каждой странице работы необходимо оставлять поля 4-5 см. для замечаний рецензента и одну - две страницы в конце работы для заключительной рецензии;
- на обложке контрольной работы необходимо написать фамилию, инициалы, учебный шифр, специальность, курс, наименование дисциплины, номер контрольного задания;
- в списке литературы указать, какие учебники и пособия использовались при выполнении работы; ссылки на использованные источники приводятся в тексте работы.

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.

Компьютерный класс.

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 04.03.01 "Химия" и профилю подготовки "не предусмотрено".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.9 Электронная и пространственная структура
органических соединений

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Основная литература:

1. Сироткин О. С. Эволюция теории химического строения вещества А.М. Бутлерова в унитарную теорию строения химич. соед. (осн. един. химии): Монография [Электронный ресурс] / О.С. Сироткин. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2013 - 247с.: 60x88 1/16. - (Научная мысль). Режим доступа: <http://znanium.com/bookread.php?book=420415>
2. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Ч. 2: Химические базы данных/ Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, А. А. Варнек .? Казан. федер. ун-т .? Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 .? 185 с.
3. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Ч. 3: Моделирование 'структура-свойство' / И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан федер. ун-т .? Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 .? 302 с.
4. Современные физико-химические методы исследования в органической химии : учебно-методическое пособие к спецпрактикуму по физическим и физико-химическим методам исследования / Казан. федер. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова ; [авт.-сост.: к.х.н. В. А. Бурилов и др.] .? Казань : [Казанский университет], 2014 .? 131 с.

Дополнительная литература:

1. Стойков И.И., Евтюгин Г.А. Основы нанотехнологии и нанохимии: учебное пособие. Казань: Издательство Казанского (Приволжского) федерального университета. - 2010. - 237 с.
2. Суздальев И. П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. Москва URSS [ЛИБРОКОМ, 2013. 589 с.
3. Халл, М. Нанотехнологии и экология: риски, нормативно-правовое регулирование и управление / М. Халл, Д. Боумен ; пер. с англ. В.Н. Егорова, Е.В. Гуляевой .? Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013 .? 344 с.
4. Халл, М. Нанотехнологии и экология: риски, нормативно-правовое регулирование и управление [Электронный ресурс] : учеб. пособие / М. Халл, Д. Боумен. ? Электрон. дан. ? Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. ? 347 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/70723>. ? Загл. с экрана..
5. Бакстон, Ш. Введение в стереохимию органических соединений [Текст] : от метана до макромолекул / Ш. Бакстон, С. Робертс : Учебное издание ; перевод с англ. В. М. Демьянович. - М. : Мир, 2005. - 311 с.
6. Чмутова, Г.А. Учебно-методическое пособие по курсу 'Строение вещества' / Г. А. Чмутова, А. Р. Курбангалиева, М. А. Казымова ; Казан. гос. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова .? Казань : Казанский государственный университет, 2009 .? ; 21.С. 1 .? 2009 .? 35 с.
7. Чмутова Г. А., Курбангалиева А. Р., Казымова М. А. Учебно-методическое пособие по курсу 'Строение вещества'. Часть 1. [Электронный ресурс], 2009.
(Для студентов химического факультета) Режим доступа:
http://kpfu.ru/docs/F1271711730/Structure_substance_2009.pdf
8. Чмутова, Г.А. Аспекты связи 'Строение - реакционная способность': учебное пособие / Г. А. Чмутова; Казан. (Приволж.) федер. ун-т, Хим. ин-т. ?Казань: [Казанский (Приволжский) федеральный университет], 2010. ?93 с.:

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.9 Электронная и пространственная структура
органических соединений

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

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

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 "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

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.