

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**

Современные теории химической связи

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия супрамолекулярных нано- и биосистем

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) доцент, к.н. (доцент) Штырлин В.Г. (Кафедра неорганической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Valery.Shtyrlin@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-3	способностью реализовать нормы техники безопасности в лабораторных и технологических условиях (ОПК-3);
ПК-1	способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1);
ПК-2	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);
ПК-3	готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3);
ПК-4	способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК-4);
ПК-5	владением навыками составления планов, программ, проектов и других директивных документов (ПК-5);
ПК-6	способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности (ПК-6);
ПК-7	владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования (ПК-7).

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основы геометрического и алгебраического подходов к теории симметрии для молекул и твердых тел;
- основы современных методов описания химической связи;
- представления об особенностях различных типов химической связи в газовой фазе и конденсированном состоянии.

Должен уметь:

- анализировать данные расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях;
- ориентироваться в литературе, касающейся описания различных типов химической связи.

Должен владеть:

- описания симметрии молекул и твердых тел;
- расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- применять геометрический и алгебраический подходы к теории симметрии для характеристики молекул и твердых тел;
- использовать основы современных методов описания химической связи молекул, супрамолекулярных структур и твердых тел;
- обсуждать особенности различных типов химической связи в газовой фазе и конденсированном состоянии;
- анализировать данные расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях;
- ориентироваться в литературе, касающейся описания различных типов химической связи;
- рассчитывать параметры химической связи веществ в различных агрегатных состояниях.

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

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.Б.4 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Химия супрамолекулярных нано- и биосистем)" и относится к базовой (общепрофессиональной) части.

Осваивается на 1 курсе в 2 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 - 40 часа(ов), в том числе лекции - 20 часа(ов), практические занятия - 20 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 104 часа(ов).

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

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет во 2 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. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход	2	2	2	0	10
2.	Тема 2. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп).	2	2	2	0	10
3.	Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах.	2	2	2	0	10
4.	Тема 4. Квантовая химия: основные принципы.	2	2	2	0	10
5.	Тема 5. Квантовая химия молекул.	2	2	2	0	10
6.	Тема 6. Химическая связь в молекулах.	2	2	2	0	10
7.	Тема 7. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах".	2	2	2	0	10
8.	Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях.	2	2	2	0	10
9.	Тема 9. Электронная структура твердых тел.	2	2	2	0	10

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
10.	Тема 10. Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий.	2	2	2	0	14
	Итого		20	20	0	104

#### 4.2 Содержание дисциплины (модуля)

##### Тема 1. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход

Элементы и операции точечной симметрии. Описание симметрии стереохимически нежестких структур. Применение теории симметрии к установлению наличия оптической активности, дипольного момента, эквивалентных атомов, диастереотопии молекул.

Решение задач на применение геометрического подхода к теории симметрии к установлению наличия оптической активности, дипольного момента, эквивалентных атомов и диастереотопии молекул.

##### Тема 2. Тема 2. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп).

Основные свойства математической группы. Таблица умножения для группы. Подгруппы, циклические и абелевы группы. Классы сопряженных элементов. Преобразование подобия для матриц. Представления групп. Неприводимые представления. Редукция приводимых представлений. Неприводимые представления и классификация термов. Термы многоэлектронных состояний. Редукция по симметрии термов многоэлектронных систем. Правила отбора для матричных элементов. Симметрия молекулярных орбиталей.

Решение задач на редукцию приводимых представлений.

##### Тема 3. Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах.

Операции открытой симметрии. Кристаллические системы. Решетки Бравэ. Пространственные группы. Антисимметрия. Магнитные и цветные группы симметрии. Соответствие обозначений точечных группы симметрии в системах Шёнфлиса и Германа-Могена. Элементы и операции "открытой" симметрии кристаллов. Винтовая ось. Симметрия решетки: допустимые порядки поворотных и инверсионных осей. Плоскость скользящего отражения. Центрирующий оператор. Кристаллические системы и решетки Бравэ. Пространственные группы.

Распределение точечных и пространственных групп по сингониям. Голоэдрические группы. Симморфные и несимморфные пространственные группы. Обозначения пространственных групп. Соответственные элементы ?открытой? и ?закрытой? симметрии. Понятие обобщенной симметрии. Операция антисимметрии. Группы антисимметрии (магнитные или шубниковские группы). Примеры точечных групп антисимметрии:  $1?$ ,  $2?/m?$ ,  $4?$ ,  $32?$ . Цветные (беловские) группы. Некоторые применения теории симметрии в отношении кристаллов: 1) описания магнитно-упорядоченных кристаллов с помощью групп антисимметрии и цветных групп; 2) описание тензоров физических свойств кристаллов; 3) описание пиро- и пьезоэффекта; 4) описание двулучепреломления, оптической активности и энантиоморфизма кристаллов.

Квазикристаллы. Двухфрагментальная модель двумерного квазикристалла ? паркет Пенроуза.

Стандартная схема применения теории симметрии для решения физико-химических задач: 1) определяется симметрия системы; 2) составляется приводимое представление на состояниях системы; 3) проводится разложение приводимого представления на НП; 4) на основе НП классифицируются энергетические спектры и стационарные состояния системы, определяются матричные элементы и проводятся вычисления по теории возмущений (в последнем случае представление гамильтониана системы как суммы последовательно убывающих членов отражает постепенное понижение симметрии от исходной группы симметрии к ее подгруппам). Любые функции, описывающие какие-либо свойства системы, обязательно преобразуются по неприводимым представлениям этой системы.

##### Тема 4. Тема 4. Квантовая химия: основные принципы.

Основные принципы квантовой механики. Атом водорода. Многоэлектронные атомы. Линейный вариационный метод Ритца. Одноэлектронная модель. Волновая функция Хартри. Метод самосогласованного поля. Атомные орбитали. Орбитали слейтеровского типа. Спин-орбиталь. Принцип Паули. Детерминант Слейтера. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.

#### **Тема 5. Тема 5. Квантовая химия молекул.**

Уравнения Кона-Шэма. Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера. Одноэлектронные уравнения для молекул. Уравнения Рутана. Методы учета электронной корреляции в орбитальных моделях. Метод Кона-Шэма для молекул. Базисные функции для неэмпирических расчетов. Атомные базисные наборы. Молекулярные базисные наборы Попла.

#### **Тема 6. Тема 6. Химическая связь в молекулах.**

Силовой и энергетический подходы к описанию химической связи. Орбитальное описание химической связи. Молекулярные орбитали. Анализ заселенностей орбиталей. Пространственное распределение электронной плотности. Дырка Ферми. Многоатомные молекулы. Симметризованные (групповые) орбитали в разложении ЛКАО МО.

#### **Тема 7. Тема 7. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах".**

Подход Бейдера: энергетический и топологический аспекты. Анализ различных типов критических точек электронной плотности, полученных в расчетах. Связевой путь. Критическая точка связи. Критерии Наканиши-Хаяши-Нарахара. Порядок связи. Параметр эллиптичности. Распределение лапласиана электронной плотности в химических связях. Характеристики атомных взаимодействий в терминах электронной плотности и плотности кинетической энергии в критической точке связи.

#### **Тема 8. Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях.**

Описание химической связи в теории кристаллического поля, теориях поля лигандов и молекулярных орбиталей. Спектрохимический ряд. Комплексы сильного и слабого полей. Магнитные свойства комплексов. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Адиабатическое приближение. Нормальные колебания. Эффект и псевдоэффект Яна-Теллера. Анализ проявлений эффекта Яна-Теллера.

#### **Тема 9. Тема 9. Электронная структура твердых тел.**

Одноэлектронные волновые функции в кристаллах и методы их расчета. Обратное пространство. Зоны Бриллюэна. Уровень Ферми. Плотность состояний. Методы расчета волновых функций в кристаллах. Электронная структура кристаллов. Модель кластеров. Модель химической связи Гудинафа. Кооперативные эффекты Яна-Теллера и спиновые переходы в твердых телах.

#### **Тема 10. Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий.**

Метод супермолекулы. Методы теории возмущений. Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия. Донорно-акцепторные молекулярные комплексы. Специфические невалентные взаимодействия. Водородная связь. Анализ зависимостей плотности электронной энергии и лапласиана электронной энергии от характеристик межмолекулярных связей. Супрамолекулярные структуры. Расчеты гибридными методами "квантовая механика - молекулярная механика".

### **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)

Basis Set Exchange - <https://bse.pnl.gov/bse/portal>

Firefly - <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/>

Gaussian Website - <http://www.gaussian.com/>

поисковая система - [www.google.ru](http://www.google.ru)

химическая связь - [http://ru.wikiversity.org/wiki/Химическая\\_связь](http://ru.wikiversity.org/wiki/Химическая_связь)

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

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	<p>Просмотрите конспект сразу после занятий, отметьте материал конспекта лекций, который вызывает затруднения для понимания. Попытайтесь найти ответы на затруднительные вопросы, используя рекомендуемую литературу. Если самостоятельно не удалось разобраться в материале, сформулируйте вопросы и обратитесь за помощью к преподавателю на консультации или ближайшей лекции.</p> <p>Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам.</p>

Вид работ	Методические рекомендации
практические занятия	<p>Для успешного освоения любой дисциплины необходима творческая, планомерная, повседневная работа, которая доставляет радость открытия нового и эстетическое наслаждение от глубокого проникновения в познание Истины, Гармонии и Красоты нашего удивительного мира, в котором царят законы, порождающие Порядок из Хаоса. 'Не то, что мните вы, природа: не слепок, не бездушный лик - в ней есть душа, в ней есть свобода, в ней есть любовь, в ней есть язык?' (Федор Тютчев).</p> <p>Во время практических и самостоятельных работ необходимо постоянно углублять свои представления об основных понятиях, концепциях, принципах и законах природы, которые были предметом рассмотрения на соответствующих лекционных занятиях. Перед началом каждого практического занятия полезно еще раз просмотреть рабочую программу и спросить себя, в какой мере Вы уже сумели достичь сформулированных в ней целей и решить поставленные задачи курса. Если ответ на этот вопрос Вас не удовлетворит, повторите, пожалуйста, пройденный материал по конспектам лекций и их презентациям. Если же этого окажется недостаточным, обратитесь к рекомендованной литературе, а при необходимости сформулируйте проблемные вопросы и попросите помощи преподавателя на консультации или ближайшей лекции.</p>
самостоятельная работа	<p>Обязательно находите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания и навыки по контрольным вопросам к практическим и самостоятельным занятиям. Не забывайте простую истину: 'повторение - мать учения'. Очень важно научиться гармонично переключать внимание во время продолжительной работы. Это высокое искусство постигается не сразу, и Вы должны ему постоянно обучаться. С этой целью через каждые 40 минут лекционных и практических занятий мы на 3-4 минуты переключаемся на вопросы, представляющие эстетическую и нравственную ценность, или приводим исторические и биографические сведения, активизируя тем самым образное мышление и давая кратковременный отдых тем отделам мозга, который испытывали большую нагрузку при абстрактном мышлении. Поступайте так же и при выполнении самостоятельных работ. Если Вы будете следовать этим простым рекомендациям и, кроме того, иметь полноценный сон, Вы никогда не устанете, но всегда будете пребывать в состоянии душевного подъема, любви ко всему живому, радости жизни и преуспеете во всех делах, а не только в освоении данного курса.</p> <p>Поскольку, на наш взгляд, 'ключом высшего образования любого специалиста (бакалавра, магистра, доктора) должно стать познание математики, языков и истории в их триединстве' (см. презентацию к Лекции 1), настоящие занятия начинаются с центральной математической дисциплины - теории симметрии.</p>
зачет	<p>Подготовка к зачету способствует закреплению, углублению и обобщению знаний, получаемых, в процессе обучения, а также применению их к решению практических задач. Готовясь к зачету, студент ликвидирует имеющиеся пробелы в знаниях, углубляет, систематизирует и упорядочивает свои знания. На зачете студент демонстрирует то, что он приобрел в процессе обучения по конкретной учебной дисциплине. При подготовке к зачету необходимо ознакомиться списком вопросов к зачету, повторно ознакомиться с лекционным материалом, систематизировать информацию по курсу. Особое внимание следует уделить разделам курса, изученным самостоятельно и вызывавшим наибольшее затруднение при теоретическом изучении и решении практических задач.</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.

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 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Химия супрамолекулярных нано- и биосистем".

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

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия супрамолекулярных нано- и биосистем

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

#### Основная литература:

1. Кочелаев, Борис Иванович (д-р физ.-мат. наук ; 1934-) . Квантовая теория : конспект лекций / Б. И. Кочелаев ; Казан. федер. ун-т, Ин-т физики, Каф теорет. физики .- [2-е изд., перераб., доп. и испр.] .- Казань : [Казанский университет], 2013 .- 222 с.
2. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 522 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66357>
3. Реутов, О.А. Органическая химия. В 4 частях. Часть 1. [Электронный ресурс] / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 570 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66361>

#### Дополнительная литература:

1. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 383 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/50535>
2. Тоуб, М. Механизмы неорганических реакций. [Электронный ресурс] / М. Тоуб, Д. Берджесс. - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 681 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66360>
3. Лорд, Э.Э. Новая геометрия для новых материалов. [Электронный ресурс] / Э.Э. Лорд, А.Л. Маккей, С. Ранганатан. - Электрон. дан. - М. : Физматлит, 2010. - 260 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/48204>
4. Паршаков, А.Н. Введение в квантовую физику. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2010. - 352 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/297>

Приложение 3  
к рабочей программе дисциплины (модуля)  
Б1.Б.4 Современные теории химической связи

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

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия супрамолекулярных нано- и биосистем

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.