

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 Б1.О.04.02

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Медицинская химия

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2019

Автор(ы): Штырлин В.Г.

Рецензент(ы): Амиров Р.Р.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Амиров Р. Р.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 20__ г.

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 20__ г.

Содержание

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

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. (доцент) Штырлин В.Г. (Кафедра неорганической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Valery.Shtyrilin@kpfu.ru

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

Выпускник, освоивший дисциплину, должен обладать следующими компетенциями:

| Шифр компетенции | Расшифровка приобретаемой компетенции |
|------------------|--|
| ОПК-1 | Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения; |
| ОПК-2 | Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук; |

Выпускник, освоивший дисциплину:

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 в структуре основной профессиональной образовательной программы высшего образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.О.04.02 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Медицинская химия)" и относится к обязательным дисциплинам. 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. Тема 1. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход | 2 | 2 | 2 | 0 | 10 |
| 2. | Тема 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. Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах. | 2 | 2 | 2 | 0 | 10 |
| 4. | Тема 4. Тема 4. Квантовая химия: основные принципы. | 2 | 2 | 2 | 0 | 10 |
| 5. | Тема 5. Тема 5. Квантовая химия молекул. | 2 | 2 | 2 | 0 | 10 |
| 6. | Тема 6. Тема 6. Химическая связь в молекулах. | 2 | 2 | 2 | 0 | 10 |
| 7. | Тема 7. Тема 7. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах". | 2 | 2 | 2 | 0 | 10 |
| 8. | Тема 8. Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях. | 2 | 2 | 2 | 0 | 10 |
| 9. | Тема 9. Тема 9. Электронная структура твердых тел. | 2 | 2 | 2 | 0 | 10 |
| 10. | Тема 10. Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий. | 2 | 2 | 2 | 0 | 14 |
| | Итого | | 20 | 20 | 0 | 104 |

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. 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. Описание магнитно-упорядоченных кристаллов. Описание тензоров свойств кристаллов. Решение задач на определение пространственных групп симметрии и характеристик твердых тел.

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-Шема 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".

Положение от 29 декабря 2018 г. № 0.1.1.67-08/328 "О порядке проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет".

Положение № 0.1.1.67-06/24/15 от 14 декабря 2015 г. "О формировании фонда оценочных средств для проведения текущей, промежуточной и итоговой аттестации обучающихся федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Положение № 0.1.1.56-06/54/11 от 26 октября 2011 г. "Об электронных образовательных ресурсах федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Регламент № 0.1.1.67-06/66/16 от 30 марта 2016 г. "Разработки, регистрации, подготовки к использованию в учебном процессе и удаления электронных образовательных ресурсов в системе электронного обучения федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Регламент № 0.1.1.67-06/11/16 от 25 января 2016 г. "О балльно-рейтинговой системе оценки знаний обучающихся в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Регламент № 0.1.1.67-06/91/13 от 21 июня 2013 г. "О порядке разработки и выпуска учебных изданий в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

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

| Этап | Форма контроля | Оцениваемые компетенции | Темы (разделы) дисциплины |
|------------------|-----------------------------|-------------------------|--|
| Семестр 2 | | | |
| | Текущий контроль | | |
| 1 | Устный опрос | ОПК-1 , ОПК-2 | 1. Тема 1. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход 2. Тема 2. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп). 3. Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах. 4. Тема 4. Квантовая химия: основные принципы. 5. Тема 5. Квантовая химия молекул. 6. Тема 6. Химическая связь в молекулах. 7. Тема 7. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах". 8. Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях. 9. Тема 9. Электронная структура твердых тел. 10. Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий. |
| 2 | Контрольная работа | ОПК-1 , ОПК-2 | 1. Тема 1. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход 2. Тема 2. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп). 3. Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах. |
| 3 | Письменное домашнее задание | ОПК-1 , ОПК-2 | 5. Тема 5. Квантовая химия молекул. 6. Тема 6. Химическая связь в молекулах. 7. Тема 7. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах". 8. Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях. |
| | Зачет | ОПК-1, ОПК-2 | |

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

| Форма контроля | Критерии оценивания | | | | Этап |
|-------------------------|---------------------|--------|--------|-------|------|
| | Отлично | Хорошо | Удовл. | Неуд. | |
| Семестр 2 | | | | | |
| Текущий контроль | | | | | |

| Форма контроля | Критерии оценивания | | | | Этап |
|-----------------------------|--|---|---|--|------|
| | Отлично | Хорошо | Удовл. | Неуд. | |
| Устный опрос | В ответе качественно раскрыто содержание темы. Ответ хорошо структурирован. Прекрасно освоен понятийный аппарат. Продемонстрирован высокий уровень понимания материала. Превосходное умение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения. | Основные вопросы темы раскрыты. Структура ответа в целом адекватна теме. Хорошо освоен понятийный аппарат. Продемонстрирован хороший уровень понимания материала. Хорошее умение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения. | Тема частично раскрыта. Ответ слабо структурирован. Понятийный аппарат освоен частично. Понимание отдельных положений из материала по теме. Удовлетворительное умение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения. | Тема не раскрыта. Понятийный аппарат освоен неудовлетворительно. Понимание материала фрагментарное или отсутствует. Неумение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения. | 1 |
| Контрольная работа | Правильно выполнены все задания. Продемонстрирован высокий уровень владения материалом. Проявлены превосходные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий. | Правильно выполнена большая часть заданий. Присутствуют незначительные ошибки. Продемонстрирован хороший уровень владения материалом. Проявлены средние способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий. | Задания выполнены более чем наполовину. Присутствуют серьезные ошибки. Продемонстрирован удовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены низкие способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий. | Задания выполнены менее чем наполовину. Продемонстрирован неудовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены недостаточные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий. | 2 |
| Письменное домашнее задание | Правильно выполнены все задания. Продемонстрирован высокий уровень владения материалом. Проявлены превосходные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий. | Правильно выполнена большая часть заданий. Присутствуют незначительные ошибки. Продемонстрирован хороший уровень владения материалом. Проявлены средние способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий. | Задания выполнены более чем наполовину. Присутствуют серьезные ошибки. Продемонстрирован удовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены низкие способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий. | Задания выполнены менее чем наполовину. Продемонстрирован неудовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены недостаточные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий. | 3 |
| | Зачтено | | Не зачтено | | |
| Зачет | Обучающийся обнаружил знание основного учебно-программного материала в объеме, необходимом для дальнейшей учебы и предстоящей работы по специальности, справился с выполнением заданий, предусмотренных программой дисциплины. | | Обучающийся обнаружил значительные пробелы в знаниях основного учебно-программного материала, допустил принципиальные ошибки в выполнении предусмотренных программой заданий и не способен продолжить обучение или приступить по окончании университета к профессиональной деятельности без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине. | | |

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

Семестр 2

Текущий контроль

1. Устный опрос

Темы 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10

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

Вопросы к устному опросу:

1. Элементы и операции точечной симметрии.
2. Применение теории симметрии к установлению наличия оптической активности.
3. Применение теории симметрии к установлению наличия дипольного момента.
4. Применение теории симметрии к установлению наличия эквивалентных атомов.
5. Применение теории симметрии к установлению наличия диастереотопии молекул.

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

Вопросы к устному опросу:

1. Основные свойства математической группы.
2. Таблица умножения для группы.
3. Подгруппы, циклические и абелевы группы.
4. Классы сопряженных элементов.
5. Преобразование подобия для матриц.
6. Представления групп.
7. Неприводимые представления.
8. Редукция приводимых представлений.
9. Правила отбора для матричных элементов.
10. Симметрия молекулярных орбиталей.

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

Вопросы к устному опросу:

1. Операции открытой симметрии.
2. Кристаллические системы.
3. Решетки Бравэ.
4. Пространственные группы.
5. Антисимметрия.
6. Магнитные и цветные группы симметрии.
7. Тензоры физических свойств кристаллов.

Тема 4. Квантовая химия: основные принципы.

Вопросы к устному опросу:

1. Основные принципы квантовой механики.
2. Атом водорода.
3. Многоэлектронные атомы.
4. Линейный вариационный метод Ритца.
5. Одноэлектронная модель.
6. Волновая функция Хартри.
7. Метод самосогласованного поля.
8. Орбитали слейтеровского типа.
9. Спин-орбиталь.
10. Принцип Паули.
11. Детерминант Слейтера.
12. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.

Тема 5. Квантовая химия молекул.

Вопросы к устному опросу:

1. Уравнения Кона-Шэма.
2. Уравнение Шредингера для молекул.
3. Приближение Борна-Оппенгеймера.
4. Одноэлектронные уравнения для молекул.
5. Уравнения Рутана.
6. Методы учета электронной корреляции в орбитальных моделях.
7. Метод Кона-Шема для молекул.
8. Базисные функции для неэмпирических расчетов.
9. Атомные базисные наборы.
10. Молекулярные базисные наборы Попла.

Тема 6. Химическая связь в молекулах.

Вопросы к устному опросу:

1. Силовой подход к описанию химической связи.
2. Энергетический подход к описанию химической связи.
3. Орбитальное описание химической связи.
4. Молекулярные орбитали.
5. Методы анализа заселенностей орбиталей.

6. Пространственное распределение электронной плотности.

7. Дырка Ферми.

8. Симметризованные орбитали в разложении ЛКАО МО.

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

Вопросы к устному опросу:

1. Энергетический аспект подхода Бейдера.

2. Топологический аспект подхода Бейдера.

3. Типы критических точек электронной плотности.

4. Связевый путь.

5. Критическая точка связи.

6. Критерии Наканиши-Хаяши-Нарахара.

7. Порядок связи.

8. Параметр эллиптичности.

9. Распределение лапласиана электронной плотности в химических связях.

10. Характеристики атомных взаимодействий в терминах электронной плотности в критической точке связи.

11. Характеристики атомных взаимодействий в терминах плотности кинетической энергии в критической точке связи.

Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях.

Вопросы к устному опросу:

1. Описание химической связи в теории кристаллического поля.

2. Теория поля лигандов и молекулярных орбиталей.

3. Спектрохимический ряд.

4. Комплексы сильного и слабого полей.

5. Магнитные свойства комплексов.

6. Энергия стабилизации кристаллическим полем.

7. Адиабатическое приближение.

8. Нормальные колебания.

9. Эффект Яна-Теллера.

10. Псевдоэффект Яна-Теллера.

11. Спин-кроссовер.

Тема 9. Электронная структура твердых тел.

Вопросы к устному опросу:

1. Одноэлектронные волновые функции в кристаллах и методы их расчета.

2. Приближение локальной плотности.

3. Обратное пространство.

4. Зоны Бриллюэна.

5. Уровень Ферми.

6. Плотность состояний.

7. Методы расчета волновых функций в кристаллах.

8. Зонная структура твердых тел.

9. Модель кластеров.

10. Модель Гудинафа.

11. Кооперативные эффекты Яна-Теллера и спиновые переходы в твердых телах.

Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий.

Вопросы к устному опросу:

1. Метод супермолекулы.

2. Методы теории возмущений.

3. Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия.

4. Донорно-акцепторные молекулярные комплексы.

5. Специфические невалентные взаимодействия.

6. Водородная связь.

7. Супрамолекулярные структуры.

8. Зависимости плотности электронной энергии и лапласиана электронной энергии от характеристик межмолекулярных связей.

9. Континуальные и дискретные модели учета эффектов растворителя.

10. Расчеты гибридными методами "квантовая механика - молекулярная механика".

11. Применения к расчетам структур молекул моделей диэлектрического континуума и реактивного поля Онзагера, методов самосогласованного реактивного поля (SCRF) и поляризуемого континуума (PCM).

2. Контрольная работа

Темы 1, 2, 3

Вопросы к контрольной работе:

Билет ♦ 1

1. Приведите все элементы и операции точечной симметрии.
2. Что такое антисимметрия? Охарактеризуйте магнитные и цветные (беловские) группы симметрии.
3. К какой группе симметрии относится молекула SF₅Cl? Перечислите все ее операции (не элементы!) симметрии.

Билет ♦ 2

1. Приведите операции ?открытой? симметрии и их обозначения.
1. Что такое квазикристаллы и как можно объяснить их существование на примере одно- и двумерных моделей?
2. Сколько операций симметрии S_n имеется при четном n и при нечетном n? Докажите на примерах n = 3 и n = 4.

Билет ♦ 3

1. Приведите критерии наличия оптической активности и дипольного момента у молекул. К каким точечным группам относятся эти молекулы?
2. Охарактеризуйте кристаллические системы и решетки Бравэ.
3. К какой группе симметрии относится молекула POCl₃? Перечислите все ее операции (не элементы!) симметрии.

Билет ♦ 4

1. Приведите основные свойства (постулаты) математической группы. Докажите перемножением элементов, что группа C_{2v} удовлетворяет определению математической группы.
2. Что означают термины ?эквивалентные атомы?, ?диастереотопия? и ?прохиральный центр??
3. К каким группам симметрии относятся молекулы 1,2-дихлорбензола и 1,4-дихлорбензола? Перечислите все их операции (не элементы!) симметрии.

Билет ♦ 5

1. Что такое таблица умножения для группы и каковы ее основные свойства? Что такое подгруппы, циклические и абелевы группы?
2. Выведите формулы для определения допустимых порядков поворотных и поворотно-инверсионных осей в кристаллах.
3. К какой группе симметрии принадлежит тригональный (не пентагональный!) додекаэдр? Перечислите все его операции (не элементы!) симметрии?

Билет ♦ 6

1. Охарактеризуйте преобразование подобия для матриц и классы сопряженных элементов. Приведите три свойства операции сопряжения.
2. Приведите правильные многогранники (тела Платона). Что такое архимедовы и каталановы тела?
3. К какой группе симметрии относится молекула триэтилендиамина (1,4-диазабцикло[2,2,2]октан или dabco), есть ли у нее дипольный момент?

Билет ♦ 7

1. Постройте таблицу умножения для абстрактной группы из трех элементов ? E (единичный элемент), A и B, учитывая, что все строки и столбцы ее не одинаковы.
2. Выведите матрицу поворота в трехмерном пространстве вокруг оси z.
3. К какой точечной группе относится псевдотетраэдрический бис-хелатный комплекс состава M(AA)₂, имеет ли он оптическую активность и дипольный момент, каковы его эквивалентные атомы?

Билет ♦ 8

1. Дайте определения отображения, изо-, гомоморфизма и представления группы.
2. Выведите неприводимые представления и дайте таблицу характеров группы C₂.
3. Приведите формулу разложения и редуцируйте любым способом произведение представлений, E?xE?, в группе D_{3h}.

Билет ♦ 9

1. Дайте определение неприводимого представления группы и сформулируйте три главных свойства неприводимых представлений.
2. Охарактеризуйте систему обозначений Малликена для неприводимых представлений (включая буквенные обозначения и индексы).
3. К каким группам симметрии могут относиться конформеры трифениларсина при разном расположении плоскостей фенильных колец, имеют ли они оптическую активность и дипольный момент, каковы их эквивалентные атомы?

Билет ♦ 10

1. Дайте определения инвариантной подгруппы (нормального делителя группы), фактор-группы и произведения групп.
2. Запишите тензор электропроводности. Какой вид может иметь характеристическая поверхность тензора электропроводности?
3. Какова точечная группа симметрии и каковы эквивалентные атомы в биядерном комплексе три-μ-карбонил-бис(трикарбонилжелезо), имеет ли он оптическую активность и дипольный момент, каковы его эквивалентные атомы?

Билет ♦ 11

1. Сформулируйте теорему Кэли и докажите изоморфизм группы S_{3v} и симметрической группы перестановок $S(3)$.
2. К каким кристаллическим системам относятся пространственные группы $P6/22$, $I432$, $Fmm2$ и $P4/mmm$?
3. Приведите формулу разложения и редуцируйте любым способом произведение представлений, $E \times E$, в группе S_{3v} .

Билет ♦ 12

1. Опишите стандартную схему применения теории симметрии для решения физико-химических задач.
2. Запишите выражение для тензора пьезоэффекта в компактной форме и поясните смысл входящих в него компонентов.
3. Приведите формулу разложения и редуцируйте любым способом произведение представлений, $E \times T_2$, в группе T_d .

3. Письменное домашнее задание

Темы 5, 6, 7, 8

1. Приведите уравнение Кона-Шэма.
2. Запишите в общем виде уравнение Шредингера для молекул.
3. Опишите приближение Борна-Оппенгеймера.
4. Запишите одноэлектронные уравнения для молекул.
5. Запишите в общем виде уравнения Рутана.
6. Опишите метод Кона-Шема для молекул.
7. Приведите базисные функции для неэмпирических расчетов.
8. Дайте наиболее распространенные примеры атомных базисных наборов.
9. Приведите примеры молекулярных базисных наборов Попла и их обозначения.
10. Опишите силовой подход к описанию химической связи.
11. Опишите энергетический подход к описанию химической связи.
12. Приведите примеры орбитального описания химической связи.
13. Опишите основные методы анализа заселенностей орбиталей.
14. Дайте определение дырки Ферми и приведите примеры ее применения для анализа химической связи.
15. Сформулируйте принципы составления симметризованных орбиталей в разложении ЛКАО МО.
16. Опишите энергетический и топологический аспекты подхода Бейдера.
17. Сформулируйте понятия критических точек электронной плотности, связевого пути и критической точки связи.
18. Приведите критерии Наканиши-Хаяши-Нарахара и примеры их применения для анализа химических связей.
19. Дайте примеры анализа распределения лапласиана электронной плотности в химических связях для нескольких молекул.
20. Дайте примеры характеристики атомных взаимодействий в терминах электронной плотности и плотности кинетической энергии в критической точке связи.
21. Приведите примеры описания химической связи в теории кристаллического поля.
22. Опишите октаэдрический комплекс металла в рамках теорий поля лигандов и молекулярных орбиталей.
23. Приведите стандартный спектрохимический ряд и примеры его применения для описания комплексов сильного и слабого полей, а также магнитных свойств комплексов.
24. Дайте примеры оценок энергии стабилизации кристаллическим полем для октаэдрических и тетраэдрических комплексов.
25. Поясните адиабатическое приближение и приведите примеры нормальных колебаний в октаэдрических и тетраэдрических комплексах.
26. Сформулируйте теорему Яна-Теллера и опишите эффект и псевдоэффект Яна-Теллера.
27. Приведите примеры спин-кроссовера и гипотезы, объясняющие его причины.

Зачет

Вопросы к зачету:

1. Элементы и операции точечной симметрии.
2. Описание симметрии стереохимически нежестких структур.
3. Применение теории симметрии к установлению наличия оптической активности, дипольного момента, эквивалентных атомов, диастереотопии молекул.
4. Основные свойства математической группы.
5. Таблица умножения для группы. Подгруппы, циклические и абелевы группы.
6. Классы сопряженных элементов. Преобразование подобия для матриц.
7. Представления групп. Неприводимые представления.
8. Редукция приводимых представлений.
9. Неприводимые представления и классификация термов.
10. Термы многоэлектронных состояний. Редукция по симметрии термов многоэлектронных систем.
11. Правила отбора для матричных элементов.
12. Симметрия молекулярных орбиталей.
13. Операции открытой симметрии.

14. Кристаллические системы. Решетки Бравэ.
15. Пространственные группы.
16. Антисимметрия. Магнитные и цветные группы симметрии.
17. Уравнение Шредингера для молекул.
18. Приближение Борна-Оппенгеймера.
19. Обменное взаимодействие.
20. Электронная плотность в молекулах.
21. Метод самосогласованного поля.
22. Базисные наборы. Молекулярные интегралы.
23. Электронная корреляция.
24. Функционал энергии. Уравнения Кона-Шэма.
25. Обменно-корреляционные функционалы.
26. Топологический анализ распределения электронной плотности в теории Бейдера "Атомы в молекулах".
27. Континуальные и дискретные модели учета эффектов растворителя.
28. Расчет структур молекул в моделях диэлектрического континуума и реактивного поля Онзагера.
29. Расчет структур молекул с использованием методов самосогласованного реактивного поля (SCRF) и поляризуемого континуума (PCM).
30. Описание химической связи в координационных соединениях в теории кристаллического поля.
31. Описание химической связи в координационных соединениях в теориях поля лигандов и молекулярных орбиталей.
32. Спектрохимический ряд. Комплексы сильного и слабого полей. Магнитные свойства комплексов.
33. Энергия стабилизации кристаллическим полем.
34. Эффект Яна-Теллера в координационных соединениях.
35. Спин-кроссовер в координационных соединениях.
36. Одноэлектронные волновые функции в кристаллах и методы их расчета. Приближение локальной плотности. Уровень Ферми. Плотность состояний.
37. Зонная структура твердых тел.
38. Модель Гудинафа для описания твердых тел.
39. Модель кластеров для описания твердых тел.
40. Кооперативные эффекты Яна-Теллера в твердых телах.
41. Спиновые переходы в твердых телах.
42. Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия.
43. Донорно-акцепторные молекулярные комплексы.
44. Водородная связь.
45. Супрамолекулярные структуры.

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

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

Для зачёта:

56 баллов и более - "зачтено".

55 баллов и менее - "не зачтено".

Для экзамена:

86 баллов и более - "отлично".

71-85 баллов - "хорошо".

56-70 баллов - "удовлетворительно".

55 баллов и менее - "неудовлетворительно".

| Форма контроля | Процедура оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций | Этап | Количество баллов |
|-------------------------|--|------|-------------------|
| Семестр 2 | | | |
| Текущий контроль | | | |
| Устный опрос | Устный опрос проводится на практических занятиях. Обучающиеся выступают с докладами, сообщениями, дополнениями, участвуют в дискуссии, отвечают на вопросы преподавателя. Оценивается уровень домашней подготовки по теме, способность системно и логично излагать материал, анализировать, формулировать собственную позицию, отвечать на дополнительные вопросы. | 1 | 15 |

| Форма контроля | Процедура оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций | Этап | Количество баллов |
|-----------------------------|--|------|-------------------|
| Контрольная работа | Контрольная работа проводится в часы аудиторной работы. Обучающиеся получают задания для проверки усвоения пройденного материала. Работа выполняется в письменном виде и сдаётся преподавателю. Оцениваются владение материалом по теме работы, аналитические способности, владение методами, умения и навыки, необходимые для выполнения заданий. | 2 | 25 |
| Письменное домашнее задание | Обучающиеся получают задание по освещению определённых теоретических вопросов или решению задач. Работа выполняется письменно дома и сдаётся преподавателю. Оцениваются владение материалом по теме работы, аналитические способности, владение методами, умения и навыки, необходимые для выполнения заданий. | 3 | 10 |
| Зачет | Зачёт нацелен на комплексную проверку освоения дисциплины. Обучающийся получает вопрос (вопросы) либо задание (задания) и время на подготовку. Зачёт проводится в устной, письменной или компьютерной форме. Оценивается владение материалом, его системное освоение, способность применять нужные знания, навыки и умения при анализе проблемных ситуаций и решении практических заданий. | | 50 |

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

7.1 Основная литература:

1. 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: учебное пособие для вузов [Электронный ресурс] : учеб. пособие - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 522 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>
3. Хемоинформатика и молекулярное моделирование: дистанционный курс для студентов бакалавриата и магистратуры направления подготовки: 020100 'Химия' [Электронный образовательный ресурс]/Химический институт им. А.М. Бутлерова, кафедра органической химии/ Маджидов Т.И. - Казань: Казанский федеральный университет, 2013. - URL: <http://zilant.kpfu.ru/course/view.php?id=376>
4. Реутов, О.А. Органическая химия. В 4 ч. Часть 1 [Электронный ресурс] : учеб. / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 570 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94167>

7.2. Дополнительная литература:

1. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учеб. пособие - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 387 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94102>
2. Тоуб, М. Механизмы неорганических реакций [Электронный ресурс] : монография / М. Тоуб, Д. Берджесс. - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 683 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94114>
3. Сироткин О. С. Эволюция теории химического строения вещества А.М. Бутлерова в унитарную теорию строен. химич. соед. (осн. един. химии): Монография / О.С. Сироткин. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2013 - 247с.: 60x88 1/16. - (Научная мысль). - URL: <http://znanium.com/bookread2.php?book=420415>
4. 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>

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/games/>
 Gaussian Website - <http://www.gaussian.com/>
 поисковая система - www.google.ru
 химическая связь - http://ru.wikiversity.org/wiki/Химическая_связь

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

| Вид работ | Методические рекомендации |
|------------------------|--|
| лекции | <p>Изучение дисциплины следует начинать с проработки рабочей программы, особое внимание, уделяя целям и задачам, структуре и содержанию курса.</p> <p>Работа с конспектом лекций: Необходимо просматривать 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. Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам. 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. Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам.</p> |
| практические занятия | <p>Во время практических 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>Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студентов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:</p> <ul style="list-style-type: none"> - чтение рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; - подготовку к практическим занятиям, лабораторным работам и курсовой работе; - работу с Интернет-источниками; - подготовку к сдаче практических работ, выполнению тестовых заданий и сдаче зачетов и экзаменов. <p>Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.</p> |
| устный опрос | <p>При самостоятельной работе по подготовке к устному опросу необходимо ознакомиться с темой и списком вопросов по теме. Повторите лекционный материал по теме, отметьте "проблемные" точки. Определите необходимую литературу из рекомендованной к курсу, можно воспользоваться интернет-источниками. При работе с источниками, учебниками и методическими пособиями, выполняйте общие рекомендации по самостоятельной работе. Сформируйте тезисный список ответов на вопросы, со своими замечаниями и комментариями. Студент должен быть готов ответить на поставленные вопросы, аргументировать свой вариант ответа, ответить на дополнительные и уточняющие вопросы преподавателя. После окончания опроса оценить степень правильности своих ответов, уяснить суть замечаний и комментариев преподавателя.</p> |

| Вид работ | Методические рекомендации |
|-----------------------------|---|
| контрольная работа | <p>Контрольная работа является одной из составляющих учебной деятельности студента по овладению знаниями. К ее выполнению необходимо приступить только после изучения тем дисциплины.</p> <p>Целью контрольной работы является определения качества усвоения лекционного материала и части дисциплины, предназначенной для самостоятельного изучения.</p> <p>Задачи, стоящие перед студентом при подготовке и написании контрольной работы:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. закрепление полученных ранее теоретических знаний; 2. выработка навыков самостоятельной работы; 3. выяснение подготовленности студента к будущей практической работе. <p>Контрольные выполняются студентами в аудитории, под наблюдением преподавателя. Тема контрольной работы известна и проводится она по сравнительно недавно изученному материалу.</p> <p>Преподаватель готовит задания либо по вариантам, либо индивидуально для каждого студента. По содержанию работа может включать теоретический материал, задачи, тесты, расчеты и т.п. выполнению контрольной работы предшествует инструктаж преподавателя.</p> <p>Ключевым требованием при подготовке к контрольной работе выступает творческий подход, умение обрабатывать и анализировать информацию, делать самостоятельные выводы, обосновывать целесообразность и эффективность предлагаемых рекомендаций и решений проблем, четко и логично излагать свои мысли. Подготовку к контрольной работе следует начинать с повторения соответствующего раздела учебника, учебных пособий по данной теме и конспектов лекций.</p> |
| письменное домашнее задание | <p>Письменное домашнее задание предполагает углубленное рассмотрение тем и вопросов, представленных на лекциях. Студент должен не только творчески работать с литературными источниками, рекомендованными к данному курсу, но и активно привлекать дополнительные материалы из Интернета и научных статей. Материал письменного домашнего задания должен быть оформлен настолько ясно, чтобы он был понятен всем студентам данной группы.</p> <p>Выполнение письменного домашнего задания закладывает навыки будущей самостоятельной научной работы студентов.</p> |
| зачет | <p>На зачете определяется качество и объем усвоенных студентами знаний, способность к обобщению, анализу, восприятию информации, постановки цели и выбору путей ее достижения, а также умение работать с нормативными документами в рамках дисциплины. Он может проводиться в устной или письменной формах. Форму проведения определяет кафедра.</p> <p>Подготовка к зачету - процесс индивидуальный. Тем не менее, существуют некоторые правила, знания которых могут быть полезны для всех. Залогом успешной сдачи зачета является систематическая работа над учебной дисциплиной в течение семестра. Подготовку желательно вести, исходя из требований программы учебной дисциплины. Целесообразно поэтапное освоение материала, выполнение различных заданий по мере изучения соответствующих содержательных разделов дисциплины. Если, готовясь к зачету, вы испытываете затруднения, обращайтесь за советом к преподавателю, тем более что при систематической подготовке у вас есть такая возможность. Готовясь к зачету, лучше всего сочетать повторение теоретических вопросов с выполнением практических заданий. Требования к знаниям студентов определены федеральным государственным образовательным стандартом и рабочей программой дисциплины. Цель зачета - проверка и оценка уровня полученных студентом специальных познаний по учебной дисциплине и соответствующих им умений и навыков, а также умения логически мыслить, аргументировать избранную научную позицию, реагировать на дополнительные вопросы, ориентироваться в массиве информации, дефиниций и категорий.</p> <p>Оценке подлежат правильность и грамотность речи студента, если зачет проводится в устной форме, а также его достижения в течение семестра. Дополнительной целью зачета является формирование у студентов таких качеств, как организованность, ответственность, трудолюбие, самостоятельность. Таким образом, проверяется сложившаяся у студента система знаний по дисциплине, что играет большую роль в подготовке будущего специалиста, способствует получению им фундаментальной и профессиональной подготовки. При подготовке к зачету важно правильно и рационально распланировать свое время, чтобы успеть на качественно высоком уровне подготовиться к ответам по всем вопросам. Во время подготовки к зачету студенты также систематизируют знания, которые они приобрели при изучении основных тем курса в течение семестра. Это позволяет им уяснить логическую структуру дисциплины, объединить отдельные темы в единую систему, увидеть перспективы ее развития.</p> <p>Самостоятельная работа по подготовке к зачету во время сессии должна планироваться студентом, исходя из общего объема вопросов, вынесенных на зачет, так, чтобы за предоставленный для подготовки срок он смог равномерно распределить приблизительно равное количество вопросов для ежедневного изучения (повторения). Важно, чтобы один последний день (либо часть его) был выделен для дополнительного повторения всего объема вопросов в целом. Это позволяет студенту самостоятельно перепроверить усвоение материала.</p> |

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

Освоение дисциплины "Современные теории химической связи" предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

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

Освоение дисциплины "Современные теории химической связи" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

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 Медицинская химия .