

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



подписано электронно-цифровой подписью

### Программа дисциплины

Дополнительные главы неорганической и органической химии ФТД.Б.2

Направление подготовки: 011200.68 - Физика

Профиль подготовки: Физика сложных систем

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Недопекин О.В., Батулин Р.Г.

**Рецензент(ы):**

Аминова Р.М.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Таюрский Д. А.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_ от "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No \_\_\_ от "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No 6129314

Казань  
2014

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) инженер-проектировщик 1 категории Батулин Р.Г. Федеральный центр коллективного пользования физико-химических исследований веществ и материалов Приволжского Федерального округа КФУ , RGBatulin@kpfu.ru ; доцент, к.н. Недопекин О.В. Кафедра общей физики Отделение физики , Oleg.Nedopekin@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины "Дополнительные главы неорганической и органической химии" познакомить студентов с методами моделирования систем с химическими превращениями

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

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

Данная образовательная программа относится к факультативной дисциплине.

Минимальные требования к магистранту:

1 Знания Квантовой механики

2 Прослушать обязательный курс "Химия" в рамках подготовки бакалавров

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	Обучающийся должен обладать следующими общекультурными компетенциями (ОК): способностью продемонстрировать углубленные знания в области математики и естественных наук
ПК-1 (профессиональные компетенции)	Выпускник должен обладать следующими профессиональными компетенциями (ПК): общефункциональными: способностью свободно владеть фундаментальными разделами физики, необходимыми для решения научно-исследовательских задач (в соответствии со своей магистерской программой)
ПК-3 (профессиональные компетенции)	научно-исследовательская деятельность: способностью самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики (в соответствии с профилем магистерской программы) и решать их с помощью современной аппаратуры, оборудования, информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью использовать свободное владение профессионально-профилированными знаниями в области информационных технологий, современных компьютерных сетей, программных продуктов и ресурсов Интернет для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки
ПК-9 (профессиональные компетенции)	организационно-управленческая деятельность: способностью организовать и планировать физические исследования

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

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

2. должен уметь:

прогнозировать физико-химических свойств, находить кривые фазового равновесия

3. должен владеть:

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

4. должен демонстрировать способность и готовность:

Студент должен демонстрировать способность и готовность к решению профессиональных задач в области неорганической и органической химии, уметь

работать с научной литературой с использованием новых информационных технологий, проводить физические исследования по заданной тематике с помощью пакета программ MedeA,

а также выбору необходимых методов исследования.

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 3 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Термодимические свойства (энергетический выход реакции, энтальпия образования)	3	1-4	2	2	0	коллоквиум
2.	Тема 2. Катализ, механизмы катализа.	3	5-8	2	2	0	коллоквиум

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
3.	Тема 3. Термофизические свойства одно- и многокомпонентных жидкостей.	3	9-12	5	11	0	контрольная работа
4.	Тема 4. Количественные соотношения структура-свойство (QSAR)	3	13-18	5	11	0	контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	зачет
	Итого			14	26	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

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

###### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

ДЕ 1. Термохимические свойства Энергетический выход реакции. Энтальпия. Энтальпия образования.

###### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Расчет энергетического выхода различных реакций. Вычисление энтальпии.

##### Тема 2. Катализ, механизмы катализа.

###### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

ДЕ 2. Катализ Катализ и его механизмы и свойства. Катализ на поверхности.

###### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Химия катализа. Применение катализа.

##### Тема 3. Термофизические свойства одно- и многокомпонентных жидкостей.

###### **лекционное занятие (5 часа(ов)):**

ДЕ 3. Термофизические свойства жидкостей Одно- и многокомпанентные жидкости и их свойства. Равновесие фаз. Правило равновесия фаз Гиббса

###### **практическое занятие (11 часа(ов)):**

Численные расчеты с помощью термофизических свойств одно- и многокомпонентных жидкостей с помощью пакета программ MedeA - Gibbs

##### Тема 4. Количественные соотношения структура-свойство (QSAR)

###### **лекционное занятие (5 часа(ов)):**

ДЕ 4. Физико-химические свойства органических соединений. Температура кипения, критическая температура, плотность, показатель преломления.

###### **практическое занятие (11 часа(ов)):**

Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR). MedeA-Combi как инструмент для анализа и поиска дескрипторов на множестве соединений □ MedeA-PrediBond как пример QSAR соотношения bond strength <-> catalytic activity.

#### 4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Термохимические свойства (энергетический выход реакции, энтальпия образования)	3	1-4	подготовка к коллоквиуму	2	коллоквиум
2.	Тема 2. Катализ, механизмы катализа.	3	5-8	подготовка к коллоквиуму	2	коллоквиум
3.	Тема 3. Термофизические свойства одно- и многокомпонентных жидкостей.	3	9-12	подготовка к контрольной работе	32	контрольная работа
4.	Тема 4. Количественные соотношения структура-свойство (QSAR)	3	13-18	подготовка к контрольной работе	32	контрольная работа
	Итого				68	

## 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

При чтении данного курса используются различные образовательные технологии, такие как компьютерная симуляция физико-химических свойств различных веществ с помощью пакета программ Medea. Внеаудиторная работа и подготовка докладов на заданную тематику в виде презентаций с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающегося, таких как представление и обработка результатов, работа с научной литературой. Последующие обсуждения докладов в форме защиты работ, как психологический тренинг и симуляция защиты дипломных работ, а также умение логически излагать и объяснять полученные результаты.

## 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

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

коллоквиум, примерные вопросы:

1. Энергетический выход реакции. Энтальпия. Энтальпия образования

### Тема 2. Катализ, механизмы катализа.

коллоквиум, примерные вопросы:

2. Катализ. Типы и механизмы катализа. Химия катализа. Применение катализа. Катализ на поверхности

### Тема 3. Термофизические свойства одно- и многокомпонентных жидкостей.

контрольная работа, примерные вопросы:

3. Термофизические свойства жидкостей. Одно- и многокомпонентные жидкости. Равновесие фаз. Условия равновесия фаз и правило Гиббса.

### Тема 4. Количественные соотношения структура-свойство (QSAR)

контрольная работа , примерные вопросы:

4. Физико-химические свойства органических и неорганических соединений (температура кипения, критическая температура, плотность, показатель преломления, теплоемкость, свободная энергия Гиббса). Пакет программ Medea.

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

1. Энергетический выход реакции. Энтальпия. Энтальпия образования
2. Катализ. Типы и механизмы катализа. Химия катализа. Применение катализа. Катализ на поверхности
3. Термофизические свойства жидкостей. Одно- и многокомпонентные жидкости.
4. Физико-химические свойства органических соединений (температура кипения, критическая температура, плотность, показатель преломления).
5. Методы синтеза органических соединений
6. Равновесие фаз и его типы. Условия равновесия фаз и правило Гиббса.
7. Пакет программного обеспечения Medea. Основные возможности среды Medea и основные модули.
8. Методы синтеза неорганических соединений
9. Физико-химические свойства неорганических соединений

### **7.1. Основная литература:**

- 1) Методические рекомендации по изучению курса "Химия", Ч. 1. Практические занятия, сост. Космодемьянская, С.С., Казань: ТГГПУ, 2009. - 51с.
- 2) Артеменко А.И. Органическая химия для нехимических направлений подготовки. - СПб.: Лань, 2013. - 608 с. [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=38835](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=38835)
- 3) Органическая химия: в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности "Химия" / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин .? 5-е изд. ? Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014  
Ч. 1 .? [2014] .? 566, [1] с.: ил. ((Ч. 1))

### **7.2. Дополнительная литература:**

- 1) Органическая химия: в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности "Химия" / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин .? 5-е изд. ? Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014  
Ч. 2 .? [2013] .? 622, [1] с.: ил ((ч. 2)).
- 2) Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности "Химия" / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; Моск. гос. ун-т им. М. В. Ломоносова .? Москва : БИНОМ, Лаборатория знаний, 2014  
Ч. 3 .? 2-е изд. ? [2014] .? 543, [1] с.
- 3) Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности "Химия" / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова .? Москва : БИНОМ, Лаборатория знаний, 2014  
Ч. 4 .? [2014] .? 722, [4] с. : ил..

### **7.3. Интернет-ресурсы:**

Институт теоретической химии - <http://itchem.ru/>

Катализаторы гидроочистки углеводородного сырья -

[http://htpng.samgtu.ru/sites/htpng.samgtu.ru/files/NOK\\_Catalysts.pdf](http://htpng.samgtu.ru/sites/htpng.samgtu.ru/files/NOK_Catalysts.pdf)

Неорганическая химия - <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/thermo/welcome.html>

Общий курс органической химии - <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/nen/>

Учебные материалы по неорганической химии - <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/inorg.html>

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)**

Освоение дисциплины "Дополнительные главы неорганической и органической химии" 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.

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



Автор(ы):

Недопекин О.В. \_\_\_\_\_

Батулин Р.Г. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Аминова Р.М. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.