

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Электронно-вычислительные машины в химических расчетах Б2.ДВ.4

Направление подготовки: 020100.62 - Химия

Профиль подготовки: Химия высокомолекулярных и элементоорганических соединений

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Сальников Ю.И., Чевела В.В.

Рецензент(ы):

Девятов Ф.В.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Амиров Р. Р.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

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

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No 763314

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) профессор, д.н. (профессор) Сальников Ю.И. Кафедра неорганической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова , Jura.Salnikov@kpfu.ru ; профессор, д.н. (профессор) Чевела В.В. Кафедра неорганической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова , Vladimir.Chevela@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

освоение методов математического описания сложных равновесных систем.

освоение методов оптимизации структуры комплексов.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б2.ДВ.4 Общепрофессиональный" основной образовательной программы 020100.62 Химия и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 3 курсе, 6 семестр.

Данная программа связана с предшествующими курсами физической химии, квантовой химии, строения вещества, информатики. Обучающийся должен знать основы химической термодинамики, квантовой химии и строения вещества. Обучающийся также должен иметь навыки практической работы с ЭВМ, желательное знание пакета Matcad. Освоение данного курса необходимо для выполнения курсовых и дипломных работ, для прохождения практикума по магнетохимии.

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-14 (общекультурные компетенции)	умеет работать в коллективе, готов к сотрудничеству с коллегами, способен к разрешению конфликтов и социальной адаптации
ОК-6 (общекультурные компетенции)	использует основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применяет методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

общие закономерности протекания химических реакций в растворах и твердой фазе, основы химической термодинамики основные типы координационных полиэдров металлов, основные типы полиядерных комплексов.

2. должен уметь:

представлять набор равновесий в виде стехиометрической матрицы, проводить расчет равновесного состава с использованием пакета Matcad, рассчитывать геометрические параметры координационных полиэдров

3. должен владеть:

теоретическими знаниями о химическом эксперименте и возможностях статистических представлений при качественном и количественном описании сложных равновесных систем

4. должен демонстрировать способность и готовность:

теоретические знания о химическом эксперименте и возможности статистических представлений при качественном и количественном описании сложных равновесных систем

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 6 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. Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях.	6	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Формы учета материального баланса и условий равновесия.	6	2	2	0	0	
3.	Тема 3. Постановка обратных химических задач. Модельный объект и его неизвестные состояния.	6	3	2	0	0	
4.	Тема 4. Экспериментальное поле наблюдений. Теоретическое поле измерений	6	4	2	0	0	
5.	Тема 5. Модели экспериментального материала. Законы распределения вероятностей нахождения экспериментального и теоретических полей.	6	5	2	0	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
6.	Тема 6. Прямые и обратные задачи химического равновесия. Математическая трактовка. Физическая трактовка	6	6	2	0	0	
7.	Тема 7. Количественные обратные задачи. Типовые модели экспериментального материала	6	7	2	0	0	
8.	Тема 8. Функции образования в двухбазисных и многобазисных системах по данным физико-химических измерений.	6	8	2	0	0	
9.	Тема 9. Некоторые типовые оценочные процедуры. Метод максимального правдоподобия. Функции достаточного приема.	6	9	2	0	0	
10.	Тема 10. Описание мооядерных комплексов с координационными числами 5-12	6	10	2	0	0	
11.	Тема 11. Метод молекулярной механики. Модель Дашевского-Плямоватого	6	11	2	0	0	
12.	Тема 12. Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров	6	12	2	0	0	
13.	Тема 13. Метод парамагнитного двулучепреломления	6	13	2	0	0	
14.	Тема 14. Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления	6	14	2	0	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
15.	Тема 15. Моделирование константы парамагнитного двулучепреломления с помощью метода молекулярной механики.	6	15	2	0	0	
16.	Тема 16. Структура монотартратов лантаноидов. Моделирование лигандного скелета	6	16	2	0	0	
17.	Тема 17. Учет гидратного окружения, выбор наиболее значимых стартовых структур	6	17	2	0	0	
18.	Тема 18. Основные составляющие подхода к моделированию структуры комплекса	6	18	2	0	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	6		0	0	0	зачет
	Итого			36	0	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Этапы развития решения прямых и обратных задач при количественно-качественном описании химических исследований Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях. Методы их определения. Методы минимизации детерминанта матрицы выбранных базисных частиц.

Тема 2. Формы учета материального баланса и условий равновесия.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях. Формы учета материального баланса и условий равновесия

Тема 3. Постановка обратных химических задач. Модельный объект и его неизвестные состояния.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Модельный объект и его неизвестные состояния. Модельный объект ? совокупность источников полей в области наблюдений, характеризуемую множеством возможных состояний для которых на основании известных законов природы, могут быть предсказаны ожидаемые значения полей. Три типовые разновидности неизвестных состояний модельного объекта: а) Качественные состояния б) Количественные состояния в) Качественно количественные состояния

Тема 4. Экспериментальное поле наблюдений. Теоретическое поле измерений

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Экспериментальное поле наблюдений. Теоретическое поле сравнений. Функции прямого а расчет теоретического поля для методов рН-метрии, спектрофотометрии, метода растворимости, метода ЯМР и потенциометрического метода.

Тема 5. Модели экспериментального материала. Законы распределения вероятностей нахождения экспериментального и теоретических полей.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Модели экспериментального материала. Законы распределения вероятностей расхождения экспериментального и теоретических полей. Линейный закон и метод максимального правдоподобия (эвристический метод).

Тема 6. Прямые и обратные задачи химического равновесия. Математическая трактовка. Физическая трактовка

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Прямые и обратные задачи химического равновесия (Mathcad, CPRESS). Математическая трактовка. Физическая трактовка. Прямая задача расчета равновесного состава сложной системы. Обратная задача. Определение термодинамических и качественных параметров в экспериментальном поле качественных и количественных наблюдений.

Тема 7. Количественные обратные задачи. Типовые модели экспериментального материала

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Количественные обратные задачи. Типовые модели экспериментального материала. Модели прямых измерений. Модели косвенных измерений с линейной зависимостью модельного поля от неизвестных параметров.

Тема 8. Функции образования в двухбазисных и многобазисных системах по данным физико-химических измерений.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Функции образования в двухбазисных и многобазисных системах по данным физико-химических измерений (рН-метрии, ЯМР-релаксации, метода растворимости, спектроскопии и потенциометрии).

Тема 9. Некоторые типовые оценочные процедуры. Метод максимального правдоподобия. Функции достаточного приема.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Некоторые типовые оценочные процедуры. Оценивание с использованием готовых теоретических решений. Метод максимального правдоподобия. Функции достаточного приема. Замечания относительно оптимальных методов оценивания. Метод наименьших квадратов.

Тема 10. Описание моноядерных комплексов с координационными числами 5-12

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Описание моноядерных комплексов с координационными числами 5-12

Тема 11. Метод молекулярной механики. Модель Дашевского-Плямоватого

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Метод молекулярной механики. Модель Дашевского-Плямоватого Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров.

Тема 12. Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров

Тема 13. Метод парамагнитного двулучепреломления

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Метод парамагнитного двулучепреломления Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления.

Тема 14. Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления

Тема 15. Моделирование константы парамагнитного двулучепреломления с помощью метода молекулярной механики.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Моделирование константы парамагнитного двулучепреломления с помощью метода молекулярной механики.

Тема 16. Структура монотартратов лантаноидов. Моделирование лигандного скелета

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Структура монотартратов лантаноидов. Моделирование лигандного скелета Учет гидратного окружения, выбор наиболее значимых стартовых структур

Тема 17. Учет гидратного окружения, выбор наиболее значимых стартовых структур

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Знакомство с мате-матической программой Mathcad оператор для решения нелинейных задач

Тема 18. Основные составляющие подхода к моделированию структуры комплекса

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Основные составляющие подхода к моделированию структуры комплекса

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. Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях.	6	1	Тема: Метод последовательного сужения области поиска поиска.	2	Домашнее задание
2.	Тема 2. Формы учета материального баланса и условий равновесия.	6	2	Тема: Оценивание неизвестных параметров при известной матрице ковариации случайной компоненты	2	Домашнее задание
3.	Тема 3. Постановка обратных химических задач. Модельный объект и его неизвестные состояния.	6	3	Тема: Постановка обратных химических задач.	2	Домашнее задание
4.	Тема 4. Экспериментальное поле наблюдений. Теоретическое поле измерений	6	4	Тема: Оценивание путем минимизации меры расхождения экспериментального и теоретического полей	2	Домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
5.	Тема 5. Модели экспериментального материала. Законы распределения вероятностей нахождения экспериментального и теоретических полей.	6	5	Тема: Законы распределения вероятностей экспериментального и теоретического полей. Ма	2	Домашнее задание
6.	Тема 6. Прямые и обратные задачи химического равновесия. Математическая трактовка. Физическая трактовка	6	6	Тема: Математическая трактовка прямых и обратных задач	2	Домашнее задание
7.	Тема 7. Количественные обратные задачи. Типовые модели экспериментального материала	6	7	Тема: Неоднозначность решения обратных задач	2	Домашнее задание
8.	Тема 8. Функции образования в двухбазисных и многобазисных системах по данным физико-химических измерений.	6	8	Тема: Функции образования в двухбазисных и многобазисных системах	2	Контрольная работа
9.	Тема 9. Некоторые типовые оценочные процедуры. Метод максимального правдоподобия. Функции достаточного приема.	6	9	Тема: Метод максимального правдоподобия	2	Домашнее задание
10.	Тема 10. Описание моноядерных комплексов с координационными числами 5-12	6	10	Тема: Математическое описание моноядерных комплексов с координационными числами 5-12 Наиболее типичные	2	Домашнее задание
11.	Тема 11. Метод молекулярной механики. Модель Дашевского-Плямоватого	6	11	Тема: Модель Дашевского-Плямоватого Общее выражение для силового поля	2	Домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
12.	Тема 12. Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров	6	12	Тема: Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров Барьеры внутреннего вращения	2	Домашнее задание
13.	Тема 13. Метод парамагнитного двулучепреломления	6	13	Тема: Метод парамагнитного двулучепреломления Схема установки для наблюдения эффекта парамагнитного	2	Домашнее задание
14.	Тема 14. Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления	6	14	Тема: Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления Область применимости	2	Домашнее задание
15.	Тема 15. Моделирование константы парамагнитного двулучепреломления с помощью метода молекулярной механики.	6	15	Тема: Моделирование константы парамагнитного двулучепреломления с помощью метода молекулярной механ	2	Домашнее задание
16.	Тема 16. Структура монотартратов лантаноидов. Моделирование лигандного скелета	6	16	Тема: Структура монотартратов лантаноидов. Моделирование лигандного скелета. Выбор исходных параметр	2	Домашнее задание
17.	Тема 17. Учет гидратного окружения, выбор наиболее значимых стартовых структур	6	17	Тема: Учет гидратного окружения. Наиболее типичные координационные числа лантаноидов	2	Домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
18.	Тема 18. Основные составляющие подхода к моделированию структуры комплекса	6	18	Тема: Основные составляющие построения модели состояния. комплекса в растворе. Учет внутриконт	2	Подготовка к контрольной работе
	Итого				36	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Компьютерные симуляции, разбор конкретных ситуаций.

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

Тема 1. Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях.

Домашнее задание , примерные вопросы:

Оценивание неизвестных параметров при известной матрице ковариации случайной компоненты.

Тема 2. Формы учета материального баланса и условий равновесия.

Домашнее задание , примерные вопросы:

Оценивание путем минимизации меры расхождения экспериментального и теоретического полей.

Тема 3. Постановка обратных химических задач. Модельный объект и его неизвестные состояния.

Домашнее задание , примерные вопросы:

Метод последовательного сужения области поиска Математическая трактовка прямых и обратных зада

Тема 4. Экспериментальное поле наблюдений. Теоретическое поле измерений

Домашнее задание , примерные вопросы:

Экспериментальное поле измерений

Тема 5. Модели экспериментального материала. Законы распределения вероятностей нахождения экспериментального и теоретических полей.

Домашнее задание , примерные вопросы:

Теоретическое модельное поле 6. Расхождение экспериментального и теоретического полей 7. Экспериментальное поле измерений

Тема 6. Прямые и обратные задачи химического равновесия. Математическая трактовка. Физическая трактовка

Домашнее задание , примерные вопросы:

Математическая трактовка прямых и обратных задач Физическая трактовка обратных задач

Тема 7. Количественные обратные задачи. Типовые модели экспериментального материала

Домашнее задание , примерные вопросы:

Количественные обратные задачи

Тема 8. Функции образования в двухбазисных и многобазисных системах по данным физико-химических измерений.

Контрольная работа, примерные вопросы:

Вопросы к контрольной работе. 1. Записать выражение для функции Бьеррума для случая образования только моноядерных комплексов в двухбазисной системе (лиганд не участвует в реакциях протонизации). 2. Записать выражение для функции Бьеррума для случая образования моно- и полиядерных комплексов в двухбазисной системе (лиганд не участвует в реакциях протонизации). 3. Записать выражение для функции Бьеррума для случая образования только моноядерных комплексов в двухбазисной системе (лиганд - двухосновная слабая кислота). 4. Записать выражение для измеряемой релаксивности (метод ЯМ Релаксации) в случае образования моно- и полиядерных комплексов в двухбазисной системе (лиганд - двухосновная слабая кислота).

Тема 9. Некоторые типовые оценочные процедуры. Метод максимального правдоподобия. Функции достаточного приема.

Домашнее задание, примерные вопросы:

Функции достаточного приема.

Тема 10. Описание моноядерных комплексов с координационными числами 5-12

Домашнее задание, примерные вопросы:

Правильные, полуправильные и неправильные полиэдры. Призмы, антипризмы, капированные полиэдры. Влияние размера хелатного цикла на характеристики координационного полиэдра. Геометрические особенности полиэдров, соответствующих координационным числам от 5 до 12.

Тема 11. Метод молекулярной механики. Модель Дашевского-Плямоватого

Домашнее задание, примерные вопросы:

Составляющие силового поля: невалентные взаимодействия, энергия деформаций углов и связей, торсионная энергия, энергия водородного связывания, энергия электростатических взаимодействий.

Тема 12. Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров

Домашнее задание, примерные вопросы:

Виды представлений торсионной энергии. Случай равновесия двух- и произвольного числа конформеров.

Тема 13. Метод парамагнитного двулучепреломления

Домашнее задание, примерные вопросы:

Принципиальная схема прибора для наблюдения эффекта парамагнитного двулучепреломления. Условия наблюдения эффекта парамагнитного двулучепреломления.

Тема 14. Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления

Домашнее задание, примерные вопросы:

Типы величин, используемых при теоретическом расчете констант- характеристик двулучепреломления в магнитном поле для диа- и парамагнетиков.

Тема 15. Моделирование константы парамагнитного двулучепреломления с помощью метода молекулярной механики.

Домашнее задание, примерные вопросы:

Выбор значений компонент оптической поляризуемости связей и магнитной восприимчивости на основе данных для модельных соединений. Проблема описания тензора магнитной восприимчивости парамагнитного иона.

Тема 16. Структура монотартратов лантаноидов. Моделирование лигандного скелета

Домашнее задание, примерные вопросы:

Выбор независимых структурных переменных - валентных и торсионных углов. Условия замыкания хелатных циклов.

Тема 17. Учет гидратного окружения, выбор наиболее значимых стартовых структур

Домашнее задание, примерные вопросы:

Моделирование гидратной сферы комплекса на примере монотартрата диспрозия.

Тема 18. Основные составляющие подхода к моделированию структуры комплекса

Подготовка к контрольной работе, примерные вопросы:

Вопросы к контрольной работе. 1. Метод последовательного сужения области поиска 2. Оценивание неизвестных параметров при известной матрице ковариации случайной компоненты 3. Оценивание путем минимизации меры расхождения экспериментального и теоретического полей 4. Метод максимального правдоподобия 5. Теоретическое модельное поле 6. Расхождение экспериментального и теоретического полей 7. Экспериментальное поле измерений 8. Неоднозначность решения обратных задач 9. Математическая трактовка прямых и обратных задач 10. Законы распределения вероятностей экспериментального и теоретического полей. Матрица ковариаций 11. Модели прямых измерений. Модель косвенных измерений с линейной зависимостью. 12. Модельный объект и его неизвестные состояния 13. Общая модель измерений 14. Физическая трактовка обратных задач 15. Оценивание с использованием готовых теоретических полей. 16. Функции достаточного приема. 17. Итерационная процедура Ньютона-Лекама 18. Градиентный перебор неизвестных параметров

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Примеры билетов к зачету

Билет 1

1. Метод последовательного сужения области поиска.
2. Оценивание неизвестных параметров при известной матрице ковариации случайной компоненты.

БИЛЕТ 2

1. Оценивание путем минимизации меры расхождения экспериментального и теоретического полей.
2. Метод максимального правдоподобия

БИЛЕТ 3

1. Метод молекулярной механики
2. Моделирование гидратной сферы комплекса на примере монотартрата диспрозия

7.1. Основная литература:

1. Математическая обработка результатов химического эксперимента: учебно-методическое пособие для лекционного курса "Метрология" / Казан. (Приволж.) федер. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова; [сост.: Н.А. Улахович, М.П. Кутырева, Л. Г. Шайдарова, Ю. И. Сальников]. Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2010. 59 с.
2. Бакстон Ш. Р. Введение в стереохимию органических соединений: от метана до макромолекул / Ш. Бакстон, С. Робертс; пер. с англ. к.х.н. В. М. Демьянович.- Москва: Мир, 2005.-311 с.
3. Математическая обработка результатов химического эксперимента: учебно-методическое пособие для лекционного курса "Метрология"[Электронный ресурс] /Н.А. Улахович, М.П. Кутырева, Л.Г. Шайдарова, Ю.И. Сальников.- Казань: Казанский (Приволжский)Федеральный университет, 2010.- 60 с.

Режим доступа: http://kpfu.ru/publication?p_id=22275

7.2. Дополнительная литература:

1. Информатика. Базовый курс : учебное пособие для студентов высших технических учебных заведений / под ред. С. В. Симоновича . Санкт-Петербург [и др.] : Питер, 2003. 638 с.
2. Учебно-методическое пособие по Информатике / Казан. федер. ун-т; [авт.-сост.: Б. М. Насыртдинов, В. Е. Косарев].?Казань: Казанский университет, 2011. 132 с.:
3. Татаринов Д.А., Немтарев А.В. Онлайн поисковые системы научной информации. / учебно-методическое пособие. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет. 30 с.Подробности: http://kpfu.ru/publication?p_id=72662
4. Введение в хемоинформатику. Компьютерное представление химических структур: учебное пособие / Т. И. Маджидов [и др.].?Казань: Казанский университет, 2013. 173 с.
5. Математическое и компьютерное моделирование в биологии и химии. Перспективы развития : II Международная научная Интернет-конференция. Казань, 24 сентября 2013 года : материалы конференции : в 2 томах / сост. Д. Н. Синяев .- Казань : ИП Синяев Д.Н., 2013. Т.2.-143с.

7.3. Интернет-ресурсы:

- Алексеев В. М. и др. Сборник задач по оптимизации: Теория, примеры, задачи - <http://www.krelib.com/matematika/1466>
- Белеванцев В.И.Сложные равновесия в растворах - <http://icchair.niic.nsc.ru/lectures/2.shtml>
- Беликов Б. С. Решение задач по физике. Общие методы - http://krelib.com/obshaja_fizika/33781
- Программный пакет Matcad, - <http://arhivknig.com/obrazovanie/56490-fiziko-khimicheskie-raschety-na-mikro-jevm..html>
- Простов В. Н. Основы физической химии - http://krelib.com/fizicheskaja_himija_himicheskaja_fizika/14364

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Электронно-вычислительные машины в химических расчетах" 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.

Класс ЭВМ химического института

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.62 "Химия" и профилю подготовки Химия высокомолекулярных и элементоорганических соединений .

Автор(ы):

Сальников Ю.И. _____

Чевела В.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Девятов Ф.В. _____

"__" _____ 201__ г.