

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Д.А. Таюрский

» _____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Электронно-вычислительные машины в химических расчетах

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: Физическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2020

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. Бухаров М.С. (Кафедра неорганической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Mihail.Buharov@kpfu.ru

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

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-5	Способен решать стандартные задачи при проведении исследовательской работы в выбранной области химии, в том числе с использованием компьютерных технологий

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

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

Должен уметь:

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

Должен владеть:

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

Должен демонстрировать способность и готовность:

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

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.05.02 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.03.01 "Химия (Физическая химия)" и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 3 курсе в 6 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

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

Контактная работа - 37 часа(ов), в том числе лекции - 18 часа(ов), практические занятия - 18 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 1 часа(ов).

Самостоятельная работа - 35 часа(ов).

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

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 6 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. Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях.	6	1	1	0	1

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Формы учета материального баланса и условий равновесия.	6	1	1	0	2
3.	Тема 3. Постановка обратных химических задач. Модельный объект и его неизвестные состояния.	6	1	1	0	2
4.	Тема 4. Экспериментальное поле наблюдений. Теоретическое поле измерений	6	1	1	0	2
5.	Тема 5. Модели экспериментального материала. Законы распределения вероятностей нахождения экспериментального и теоретических полей.	6	1	1	0	2
6.	Тема 6. Прямые и обратные задачи химического равновесия. Математическая трактовка. Физическая трактовка	6	1	1	0	2
7.	Тема 7. Количественные обратные задачи. Типовые модели экспериментального материала	6	1	1	0	2
8.	Тема 8. Функции образования в двухбазисных и многобазисных системах по данным физико-химических измерений.	6	1	1	0	2
9.	Тема 9. Некоторые типовые оценочные процедуры. Метод максимального правдоподобия. Функции достаточного приема.	6	1	1	0	2
10.	Тема 10. Описание мономерных комплексов с координационными числами 5-12	6	1	1	0	2
11.	Тема 11. Метод молекулярной механики. Модель Дашевского-Плямоватого	6	1	1	0	2
12.	Тема 12. Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров	6	1	1	0	2
13.	Тема 13. Метод парамагнитного двулучепреломления	6	1	1	0	2
14.	Тема 14. Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления	6	1	1	0	2
15.	Тема 15. Моделирование константы парамагнитного двулучепреломления с помощью метода молекулярной механики.	6	1	1	0	2
16.	Тема 16. Структура монотартратов лантаноидов. Моделирование лигандного скелета	6	1	1	0	2
17.	Тема 17. Учет гидратного окружения, выбор наиболее значимых стартовых структур	6	1	1	0	2

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
18.	Тема 18. Основные составляющие подхода к моделированию структуры комплекса	6	1	1	0	2
	Итого		18	18	0	35

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

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

Этапы развития решения прямых и обратных задач при количественно-качественном описании химических исследований. Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях. Прямая задача - определение состояния теоретического поля в пространстве наблюдений как функция состояния модельного объекта.

Методы их определения. Методы минимизации детерминанта матрицы выбранных базисных частиц.

Тема 2. Формы учета материального баланса и условий равновесия.

Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях.

Формы учета материального баланса и условий равновесия. Математическое описание химических систем можно проводить с использованием линейной алгебры. При этом компоненты можно подразделить на зависимые и независимые. Тогда любую частицу можно получить по реакции, включающей все базисные частицы.

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

Модельный объект и его неизвестные состояния.

Модельный объект ? совокупность источников полей в области наблюдений, характеризующую множеством возможных состояний для которых на основании известных законов природы, могут быть предсказаны ожидаемые значения полей. Три типовые разновидности неизвестных состояний модельного объекта:

- Качественные состояния
- Количественные состояния
- Качественно количественные состояния

Тема 4. Экспериментальное поле наблюдений. Теоретическое поле измерений

Экспериментальное поле наблюдений. Теоретическое поле сравнений. Функции прямого расчета теоретического поля для методов pH-метрии, спектрофотометрии, метода растворимости, метода ЯМР и потенциометрического метода. Можно выделить несколько случаев: вектор измеряемых свойств содержит элементы, отличающиеся для каждой комплексной формы произвольным образом; величины всех факторов интенсивности равны нулю за исключением одного; некоторые элементы вектора равны между собой, а остальные равны нулю; элементы вектора суть стехиометрические коэффициенты по одной из базисных частиц.

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

Модели экспериментального материала. Законы распределения вероятностей расхождения экспериментального и теоретических полей. Линейный закон и метод максимального правдоподобия (эвристический метод). Для фиксированного набора данных и базовой вероятностной модели, используя метод максимального правдоподобия, мы получим значения параметров модели, которые делают данные "более близкими" к реальным. Оценка максимального правдоподобия даёт уникальный и простой способ определить решения в случае нормального распределения.

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

Прямые и обратные задачи химического равновесия (CPESP).

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

Количественные обратные задачи.

Типовые модели экспериментального материала. Модели прямых измерений. Модели косвенных измерений с линейной зависимостью модельного поля от неизвестных параметров. В общем случае математическая обработка экспериментальных данных преследует цели нахождения модели изучаемого объекта и определения параметров, характеризующих эту модель.

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

Функции образования в двухбазисных и многобазисных системах по данным физико-химических измерений (рН-метрии, ЯМР-релаксации, метода растворимости, спектроскопии и потенциометрии). Среднее число молекул компонента $b(i)$ относительно $b(j)$ представляет количество компонента, связанного в среднем на один моль $b(j) = b(2)$: $n = (b(1,0) - b(1)) / b(2)$ Используя уравнения материального баланса для долей накопления, функцию образования n можно выразить через доли накопления комплексов.

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

Некоторые типовые оценочные процедуры. Оценивание с использованием готовых теоретических решений. Произвольный набор оценочных процедур. Аддитивная модель экспериментального материала. Метод максимального правдоподобия. Функции достаточного приема. В случае, если случайная компонента некоррелирована, функция достаточного приема совпадает с функцией метода наименьших квадратов. Замечания относительно оптимальных методов оценивания. Метод наименьших квадратов.

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

Описание моноядерных комплексов с координационными числами 5-12. Координационное число 4. Случай большей выгодности квадратного окружения. Координационное число 5. Наиболее энергетически выгодная форма - тригональная бипирамида. Факторы, способствующие энергетической выгодности квадратной пирамиды. Координационное число 6. Особенности моно- бис- и трис -хелатов.

Тема 11. Метод молекулярной механики. Модель Дашевского-Плямоватого

Современное содержание понятия "структура молекулы, комплекса". Принцип Борна- Оппенгеймера. Метод молекулярной механики. Силовое поле и его потенциальные функции. Различные способы задания геометрии, внутренние координаты. Модель Дашевского-Плямоватого

Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров.

Тема 12. Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров

Необходимость введения торсионных потенциалов, их несводимость к другим типам взаимодействий. Общий вид разложения торсионной энергии в ряд Фурье. Торсионные потенциалы, описывающие внутреннее вращение в замещенных алканах.

Торсионные потенциалы карбокси - групп в зависимости от степени ионизации. Равновесие конформеров

Тема 13. Метод парамагнитного двулучепреломления

Метод парамагнитного двулучепреломления. Круговое и линейное двулучепреломление. Квадратичная зависимость двулучепреломления от напряженности магнитного поля для истинных растворов. Вклады диамагнитного, парамагнитного эффектов и гиперполяризуемости.

Экспериментальная схема наблюдения эффекта магнитного двулучепреломления.

Тема 14. Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления

Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления. Способность молекулы к ориентации внешним магнитным полем определяется соотношением компонент тензора магнитной восприимчивости, а взаимодействия со светом - компонентами тензора оптической поляризуемости.

Молекулярная характеристика двулучепреломления может быть представлена как разность рефракций для обыкновенного и необыкновенного лучей.

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

Моделирование константы парамагнитного двулучепреломления с помощью метода молекулярной механики. Для расчета геометрии комплексного соединения в силовое поле необходимо ввести определенные коррективы. В случае циклических фрагментов в комплексе необходимо наложить условия стягивания на зависимые связи. Необходимы данные по ионным радиусам ионов металлов и длинам связей металл-лиганд.

Тема 16. Структура монотартратов лантаноидов. Моделирование лигандного скелета

Первым этапом в оптимизации геометрии монотартратов лантаноидов можно считать оптимизацию геометрии лигандного скелета. Длины связей лантаноид - донорный атом кислорода надо взять как среднее значение из выборки для родственных соединений. Для расчета параметров потенциала невалентных взаимодействий необходимы данные по ионному радиусу лантаноида с наиболее вероятным координационным числом.

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

Координационная сфера иона лантаноида, содержащая лиганд, должна

быть дополнена молекулами растворителя (воды) для создания наиболее вероятного координационного числа. При этом, если считать тартрат-лиганд тридентатным, необходимо или 5 молекул воды ($KЧ=8$), или 6 ($KЧ=9$). При расчете теоретических констант двулучепреломления анизотропией магнитной восприимчивости тартрато-лиганда можно пренебречь.

Тема 18. Основные составляющие подхода к моделированию структуры комплекса

В моделировании сложных гетеро- и полиядерных комплексов совокупностью методов парамагнитного двулучепреломления и молекулярной механики можно выделить необходимость учета следующих факторов: моделирование гидратного окружения ионов металлов, учет конформационного поведения лиганда, образование ионных ассоциатов с компонентами раствора, задание параметров, учитывающих стереохимические требования иона металла.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;

- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.
Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

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

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

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	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.
практические занятия	необходимо проработать рекомендованную литературу, а также изучить руководства к программам оптимизации геометрии и математического моделирования равновесий (CPESP). Ознакомится с решениями типовых задач по построению изображений молекул и расчету геометрических характеристик, по определению состава и устойчивости комплексных форм.

Вид работ	Методические рекомендации
самостоятельная работа	<p>Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:</p> <ul style="list-style-type: none"> - чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; - подготовку к практическим занятиям, лабораторным работам; - работу с Интернет-источниками; - подготовку к сдаче практических работ, выполнению тестовых заданий и сдаче экзамена. <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>
зачет	<p>Успешная подготовка к зачету возможна лишь в случае систематической самостоятельной работы в ходе всего семестра. Непосредственно перед зачетом необходимо прочитать все конспекты лекций и решения типовых задач. При решении заданий в экзаменационном билете для рационального использования отведённого времени лучше вначале ответить на вопросы, которые вызывают меньше всего затруднений, решить расчётные задачи, а после вернуться к заданиям повышенной сложности.</p>

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

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

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

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;

- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.03.01 "Химия" и профилю подготовки "Физическая химия".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.05.02 Электронно-вычислительные машины в
химических расчетах

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: Физическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2020

Основная литература:

1. Турецкий, В. Я. Математика и информатика: учебник / В.Я. Турецкий; Уральский государственный университет им. А.М. Горького. - 3-е изд., испр. и доп. - Москва : ИНФРА-М, 2010. - 558 с. (Высшее образование). ISBN 978-5-16-000171-5. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/206346> (дата обращения: 17.03.2020). - Режим доступа: по подписке.
2. Математическая обработка результатов химического эксперимента: учебно-методическое пособие / Н.А. Улахович, М.П. Кутырева, Л.Г. Шайдарова, Ю.И. Сальников. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2010. - 60 с.
3. Математическая обработка результатов химического эксперимента: учебно-методическое пособие для лекционного курса 'Метрология'/Н.А. Улахович, М.П. Кутырева, Л.Г. Шайдарова, Ю.И. Сальников.- Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2010. - 60 с.
- Текст : электронный. - URL: http://kpfu.ru/docs/F910466741/Mat_experiment.pdf (дата обращения: 17.03.2020). - Режим доступа: открытый.

Дополнительная литература:

1. Каймин, В.А. Информатика: учебник / Каймин В.А. - 6-е изд. - Москва: НИЦ ИНФРА-М, 2016. - 285 с. - (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-16-102877-3. - Текст: электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/542614> (дата обращения: 17.03.2020). - Режим доступа : по подписке.
2. Безручко, В. Т. Информатика (курс лекций) : учебное пособие / В.Т. Безручко. - Москва : ИД 'ФОРУМ' : ИНФРА-М, 2018. - 432 с. - (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-16-100311-4. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/944064> (дата обращения: 17.03.2020). - Режим доступа : по подписке.
2. Татаринев Д.А., Немтарев А.В. Онлайн поисковые системы научной информации. / учебно-методическое пособие. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2013. - 30 с. - Текст : электронный. - URL: http://kpfu.ru/publication?p_id=72662 (дата обращения: 17.03.2020). - Режим доступа: открытый.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.05.02 Электронно-вычислительные машины в
химических расчетах

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

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: Физическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2020

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

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

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