

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



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Электронная и пространственная структура молекул

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

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): профессор-консультант Чмутова Г.А. (кафедра органической и медицинской химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Galina.Tschmutowa@kpfu.ru ; доцент, к.н. (доцент) Якимова Л.С. (кафедра органической и медицинской химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Luidmila.Savelyeva@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-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ современной химии и смежных наук при решении профессиональных задач
ПК-2	Способен применять приобретенные навыки проведения химического эксперимента, основные синтетические и аналитические методы получения и исследования химических веществ и реакций при решении профессиональных задач

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основные теории, методы и подходы для качественных предсказаний электронного и пространственного строения органических, неорганических, металлоорганических и элементоорганических соединений,
- принципы работы методов изучения пространственной и электронной структуры соединений,
- основы квантовой теории атомов в молекуле Р. Бейдера,

Должен уметь:

- ориентироваться в экспериментальных и теоретических методах исследования электронной структуры,
- приобретать, систематизировать и обобщать необходимую информацию из интернет-источников, периодической литературы, монографий,
- применять полученные знания на практике, использовать основные законы строения вещества для обоснованного выбора метода исследования, подбора партнеров для реакции, растворителя, катализатора, квалифицированно оценивать результаты эксперимента,
- проводить простейшие квантово-химические расчеты электронной структуры

Должен владеть:

- теоретическими знаниями о важнейших аспектах электронной структуры (эффективные заряды на атомах, дипольные моменты, поляризуемости, электростатический потенциал, характеристики молекулярных орбиталей, топологические индексы и т.п.)

Должен демонстрировать способность и готовность:

реализовать знания об электронной и пространственной структуре молекул для решения практических задач.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.04.02 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Хемоинформатика и молекулярное моделирование)" и относится к дисциплинам по выбору части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 1 курсе в 1 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 - 22 часа(ов), в том числе лекции - 12 часа(ов), практические занятия - 10 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 50 часа(ов).

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

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 1 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	Се-местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само-стоя-тельная ра-бота
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи-ческие занятия, всего	Практи-ческие в эл. форме	Лабора-торные работы, всего	Лабора-торные в эл. форме	
1.	Тема 1. Строение молекул (химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура).	1	1	0	0	0	0	0	3
2.	Тема 2. Строение неорганических молекул. Типы связей в них и их природа.	1	1	0	0	0	0	0	3
3.	Тема 3. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.	1	2	0	2	0	0	0	12
4.	Тема 4. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО)	1	2	0	2	0	0	0	4
5.	Тема 5. Теория атомов в молекулах Бейдера	1	2	0	2	0	0	0	4
6.	Тема 6. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.	1	2	0	2	0	0	0	12
7.	Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия	1	2	0	2	0	0	0	12
	Итого		12	0	10	0	0	0	50

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Строение молекул (химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура).

Строение молекул (химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура). Историческое развитие представлений об электронной структуре органических молекул, современное состояние, достижения и проблемы. Экспериментальные и теоретические методы изучения электронной структуры. Современный уровень знаний об электронной структуре химических соединений, основные понятия, термины, определения. Общий квантовохимический подход к получению информации о структуре и реакционной способности химических соединений. Уравнение Шредингера и его модификации. Оператор энергии, его составляющие. Многоэлектронная и одноэлектронная волновые функции. Приближение МО ЛКАО. Базисные наборы. Принципиальные особенности неэмпирических и полумэмпирических расчетов. Учет эффектов электронной корреляции.

Тема 2. Строение неорганических молекул. Типы связей в них и их природа.

Строение неорганических молекул. Типы связей в них и их природа. Координационная связь. Основные концепции для качественного предсказания структуры неорганических соединений. Концепция отталкивания валентных электронных пар и ее теоретические основы. Строение кристаллов. Методы предсказания структуры кристаллов.

Тема 3. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.

Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.

Природа химических связей в элементоорганических соединениях. Гибридные орбитали и принципы их использования в качественной теории химического строения. Классификация типов химических связей в элементоорганических соединениях. Природа связи в oleфиновых, ацетиленовых, циклопентадиенильных и ареновых комплексах переходных металлов. Кратные связи элемент-углерод и элемент-элемент. Классические (двухэлектронные двухцентровые) и многоцентровые (орбитальные) связи. Характерные особенности разных типов химической связи.

Тема 4. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО)

Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО). Канонические, локализованные, натуральные орбитали. Молекулярно-орбитальный генезис. Происхождение орбиталей CH_3 , CH_2 -, CH - органических фрагментов от МО малых молекул- AH_3 , AH_2 , AH . "Стыковка" МО-фрагментов с образованием молекул углеводородов и их функционально замещенных производных. Природа граничных МО в важнейших классах органических соединений. Основные тенденции в изменениях энергии и состава граничных орбиталей функционально замещенных алканов, алкенов, аренов RX при варьировании ключевого атома заместителя X в пределах одной группы и одного периода таблицы Менделеева.

Тема 5. Теория атомов в молекулах Бейдера

Теория атомов в молекулах Бейдера. Топологические характеристики электронного распределения (электронная плотность, градиент электронной плотности, лапласиан, концентрация зарядов в валентной оболочке и т.п.). Бассейн атома, критические точки связи, аттрактор электронной плотности, межатомная поверхность, связывающий путь. Атомные заряды по Бейдеру.

Тема 6. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.

Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.

Строение полиэдрических и каркасных структур (бораны и карбораны, металлоорганические комплексы, биоккомплексы, кластеры).

Принципы изоэлектронности и изолобальности. Правила электронного счета. Диаграммы Уолша.

Электронная структура и геометрия жестких (квазижестких) химических частиц - нейтральных молекул, ионов, радикалов, ион-радикалов, координационных полиэдров; неклассические (орбитальные) структуры и т.п. Концепция отталкивания валентных электронных пар, критические точки лапласиана электронной плотности, диаграммы Уолша.

Связь конформационных характеристик структурно-нежестких молекул с параметрами электронной структуры (разные виды сопряжения; сопряжение через связь и через пространство, трансаннулярные взаимодействия; эффект поля, 1,3- взаимодействия, обобщенный аномальный эффект и т.д.). Стереопределяющая роль граничных молекулярных орбиталей.

Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия

Межмолекулярные взаимодействия

Универсальные (ориентационные, индукционные, дисперсионные) и специфические (комплексы с водородной связью (H -комплексы), с переносом заряда (КПЗ) и т.п.) межмолекулярные взаимодействия (ММВ), их природа и интенсивность.

Влияние ММВ на физические свойства молекул: т. кип., т. пл., растворимость (специфическая и неспецифическая сольватация), адсорбцию, спектральные и другие характеристики; форму больших и малых молекул; тип кристаллической решетки (ионные, атомные, молекулярные кристаллы); химическую и физиологическую активность.

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 науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-99бин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

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

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

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

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

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

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

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

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

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

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

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

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

Basis Set Exchange: A Community Database for Computational Sciences - <https://bse.pnl.gov/bse/portal>

Программа GAMESS и материалы сайта - <https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/>

Программа AIMAll - <http://aim.tkgristmill.com>

Программа Firefly - <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>

Программы для молекулярной визуализации - https://vlab.wikia.org/ru/wiki/Молекулярное_моделирование

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

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	В ходе лекционных занятий вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации, положительный опыт в ораторском искусстве. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций.

Вид работ	Методические рекомендации
<p>практические занятия</p>	<p>Практические занятия проходят в форме семинаров. Семинарское занятие подразумевает два вида работ: подготовку сообщения на заданную тему и участие в обсуждении проблемы, затронутой сообщением. Сообщение не является принципиальным моментом семинара, будучи только провокацией, катализатором следующего за ним обсуждения. Сообщение должно занимать по времени не более 3 - 5 минут. Основной вид работы на семинаре - участие в обсуждении проблемы. Принципиальной разницы между подготовкой сообщения и подготовкой к обсуждению не существует. Отличие состоит в более тщательной работе с готовым материалом - лучшей его организация для по?дачи аудитории.</p> <p>Подготовка к практическому (семинарскому) занятию начинается с тщательного ознакомления с условиями предстоящей работы, т. е. с обращения к планам семинарских занятий. Определившись с проблемой, привлекающей наибольшее внимание, следует обратиться к рекомендуемой литературе. Имейте в виду, что в семинаре участвует вся группа, а потому задание к практическому занятию следует распределить на весь коллектив. Задание должно быть охвачено полностью и рекомендованная литература должна быть освоена группой в полном объёме. Для полноценной подготовки к практическому занятию чтения учебника крайне недостаточно - в учебных пособиях излагаются только принципиальные основы, в то время как в монографиях и статьях на ту или иную тему поднимаемый вопрос рассматривается с разных ракурсов или ракурса одного, но в любом случае достаточно подробно и глубоко. Тем не менее, для того, чтобы должным образом сориентироваться в сути задания, сначала следует ознакомиться с соответствующим текстом учебника - вне зависимости от того, предусмотрена ли лекция в дополнение к данному семинару или нет.</p> <p>Оценив задание и подобрав соответствующую литературу, можно приступать собственно к подготовке к семинару. Работа над литературой, статья ли это или монография, состоит из трёх этапов - чтения работы, её конспектирования, заключительного обобщения сути изучаемой работы. Прежде, чем браться за конспектирование, скажем, статьи, следует её хотя бы однажды прочитать, чтобы составить о ней предварительное мнение, постараться выделить основную мысль или несколько базовых точек, опираясь на которые можно будет в дальнейшем работать с текстом. Конспектирование - дело очень тонкое и трудоёмкое, в общем виде может быть определено как фиксация основных положений и отличительных черт рассматриваемого труда вкюпе с творческой переработкой идей, в нём содержащихся.</p> <p>Конспектирование - один из эффективных способов усвоения письменного текста. Хотя само конспектирование уже может рассматриваться как обобщение, тем не менее есть смысл выделить последнееособицей, поскольку в ходе заключительного обобщения идеи изучаемой работы окончательно утверждаются в сознании изучающего. Достоинством заключительного обобщения как самостоятельного этапа работы с текстом является то, что здесь читатель, будучи автором обобщений, отделяет себя от статьи, что является гарантией независимости читателя от текста. Если программа занятия предусматривает работу с источником, то этой стороне подготовки к семинару следует уделить пристальное внимание. В сущности разбор источника не отличается от работы с литературой - то же чтение, конспектирование, обобщение. Тщательная подготовка к семинарским занятиям, как и к лекциям, имеет определяющее значение: семинар пройдёт так, как аудитория подготовилась к его проведению.</p>
<p>самостоятельная работа</p>	<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, устным опросам и контрольной работе; - работу с Интернет-источниками; - подготовку к сдаче практических работ, защите практической работы, сдаче экзамена, выполнение домашнего задания. <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> <p>Работа с конспектом лекций</p> <p>Просмотрите конспект сразу после занятий, отметьте материал конспекта лекций, который вызывает затруднения для понимания. Попытайтесь найти ответы на затруднительные вопросы, используя рекомендуемую литературу. Если самостоятельно не удалось разобраться в материале, сформулируйте вопросы и обратитесь за помощью к преподавателю на консультации или ближайшей лекции.</p> <p>Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам.</p>

Вид работ	Методические рекомендации
зачет	Подготовка к зачету способствует закреплению, углублению и обобщению знаний, получаемых, в процессе обучения, а также применению их к решению практических задач. Готовясь к зачету, студент ликвидирует имеющиеся пробелы в знаниях, углубляет, систематизирует и упорядочивает свои знания. На зачете студент демонстрирует то, что он приобрел в процессе обучения по конкретной учебной дисциплине. При подготовке к зачету необходимо ознакомиться списком вопросов к зачету, повторно ознакомиться с лекционным материалом, систематизировать информацию по курсу. Особое внимание следует уделить разделам курса, изученным самостоятельно и вызывавшим наибольшие затруднение при теоретическом изучении и решении практических задач.

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

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

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

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

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

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

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

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

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

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи;
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Хемоинформатика и молекулярное моделирование".

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

Основная литература:

1. Реутов, О. А. Органическая химия: учебник : в 4 частях / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; художники В. А. Чернецов [и др.]. - 10-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2021 - Часть 2 - 2021. - 626 с. - ISBN 978-5-906828-43-9. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/166750> (дата обращения: 28.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Каплан, И. Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы: учебное пособие / И. Г. Каплан ; под редакцией Н. Ф. Степанова ; перевод с английского Д. С. Безрукова, И. Г. Рябинкина. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 397 с. - ISBN 978-5-00101-503-1. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/94111> (дата обращения: 28.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. - 3-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2019. - 428 с. - ISBN 978-5-8114-3961-4. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/113631> (дата обращения: 28.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
4. Камышов, В. М. Строение вещества : учебное пособие / В. М. Камышов, Е. Г. Мирошникова, В. П. Татауров. - 3-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 236 с. - ISBN 978-5-8114-2313-2. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/169154> (дата обращения: 28.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература:

1. Бутиков, Е. И. Физика : учебное пособие : в 3 книгах / Е. И. Бутиков, А. С. Кондратьев, В. М. Уздин. - Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2020 - Книга 3 : Строение и свойства вещества - 2020. - 366 с. - ISBN 978-5-9221-0109-7. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/185582> (дата обращения: 28.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Травень, В. Ф. Органическая химия : учебное пособие / В. Ф. Травень. - 7-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020 - Том 1 - 2020. - 401 с. - ISBN 978-5-00101-746-2. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/151522> (дата обращения: 28.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Травень, В. Ф. Органическая химия : учебное пособие / В. Ф. Травень. - 7-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020 - Том 2 - 2020. - 550 с. - ISBN 978-5-00101-747-9. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/151523> (дата обращения: 28.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
4. Грибов, Л. А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул: учебное пособие / Л.А. Грибов. - Долгопрудный: Интеллект, 2010. - 312 с. ISBN 978-5-91559-082-2. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/193501> (дата обращения: 28.05.2021). - Режим доступа : по подписке.
5. Сироткин, О. С. Эволюция теории химического строения вещества А.М. Бутлерова в унитарную теорию строения химических соединений (основы единой химии) : монография / О. С. Сироткин. - Москва : ИНФРА-М, 2020. - 247 с. - (Научная мысль). - ISBN 978-5-16-009053-5. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1036451> (дата обращения: 28.05.2021). - Режим доступа : по подписке.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.04.02 Электронная и пространственная структура
молекул

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

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

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.