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
_____ Турилова Е.А.
"___"_____20___ г.

Программа дисциплины

Структура конформационно-нежестких полиядерных комплексов

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия
Профиль подготовки: Химия
Квалификация выпускника: бакалавр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2024

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, д.н. (профессор) Чевела В.В. (Кафедра неорганической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Vladimir.Chevela@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 фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

-современное содержание понятия "структура",

- различные типы координационных полиэдров

- особенности моделирования структур комплексов в водных растворах,

- составляющие стерической энергии молекулы

Должен уметь:

ориентироваться в учебной, монографической, справочной и журнальной литературе в области структурной химии

Должен владеть:

навыками построения стартовых структур для оптимизации геометрии

Должен демонстрировать способность и готовность:

Демонстрировать навыки построения стартовых структур для оптимизации геометрии

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.15.03 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.03.01 "Химия (Химия)" и относится к дисциплинам по выбору части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 4 курсе в 8 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 - 40 часа(ов), в том числе лекции - 40 часа(ов), практические занятия - 0 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 32 часа(ов).

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

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 8 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, всего	Лекции в эл. форме	Практические занятия, всего	Практические в эл. форме	Лабораторные работы, всего	Лабораторные в эл. форме	
1.	Тема 1. Современное содержание понятия.								

Структура комплекса.

8	2	0	0	0	0	0	1

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Самостоятельная работа
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практические занятия, всего	Практические в эл. форме	Лабораторные работы, всего	Лабораторные в эл. форме	
2.	Тема 2. Стереохимическая теория Киперта	8	2	0	0	0	0	0	2
3.	Тема 3. Характеристика координационных полиэдров	8	2	0	0	0	0	0	2
4.	Тема 4. Описание моноядерных комплексов с координационными числами 5-12.	8	2	0	0	0	0	0	2
5.	Тема 5. Метод молекулярной механики. Модель Дашевского-Плямоватого	8	2	0	0	0	0	0	2
6.	Тема 6. Атом-атом потенциалы. Приближение парной аддитивности	8	2	0	0	0	0	0	2
7.	Тема 7. Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров	8	2	0	0	0	0	0	2
8.	Тема 8. Метод парамагнитного двулучепреломления	8	2	0	0	0	0	0	2
9.	Тема 9. Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления.	8	4	0	0	0	0	0	2
10.	Тема 10. Моделирование константы парамагнитного двулучепреломления с помощью метода молекулярной	8	4	0	0	0	0	0	2
11.	Тема 11. Структура монотартратов лантаноидов. Моделирование лигандного скелета	8	2	0	0	0	0	0	2
12.	Тема 12. Учет гидратного окружения, выбор наиболее значимых стартовых структур	8	2	0	0	0	0	0	2
13.	Тема 13. Структурные мотивы цитратов и тартратов переходных элементов.	8	2	0	0	0	0	0	2
14.	Тема 14. Биядерные цитраты и тартраты лантаноидов, железа(III), оксованадия(IV), алюминия(III)	8	2	0	0	0	0	0	2
15.	Тема 15. Стереоэффекты образования тартратных комплексов	8	2	0	0	0	0	0	2
16.	Тема 16. Основные струкуры тетраядерных цитратов и тартратов. Выбор модели координационной сферы	8	2	0	0	0	0	0	1
17.	Тема 17. Стереоэфекты в образовании тетраядерных тартратных комплексов	8	2	0	0	0	0	0	1
18.	Тема 18. Основные составляющие подхода к моделированию структуры комплекса	8	2	0	0	0	0	0	1
	Итого		40	0	0	0	0	0	32

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Современное содержание понятия. Структура комплекса.

Введение. Современное содержание понятия. Структура молекулы, Структура комплекса. Квантовохимические и механические модели.

Теория Киперта. В основе данной теории лежит идея, что стереохимическое расположение лигандов вокруг центрального атома определяется взаимным отталкиванием всех химических связей. При этом считается, что центральный атом не играет никакой роли в определении пространственной конфигурации комплекса, не определяет предпочтительный выбор направления связи и не экранирует окружающие его связи. Расчеты основаны на минимизации полной энергии отталкивания, получаемой суммирования энергий отталкивания по всем парам связей центральный ион - лиганд.

Тема 2. Стереохимическая теория Киперта

Правильные полиэдры. Существует только 5 правильных полиэдров (тел Платона). Это тетраэдр, октаэдр, куб, икосаэдр, пентагональный додекаэдр. Значение для стереохимии. Редкость кубического окружения. Полуправильные полиэдры. В полуправильных полиэдрах все вершины идентичны, все ребра имеют одинаковую длину, все грани - правильные многоугольники, но не все грани идентичны. Полуправильные полиэдры подразделяются на три группы ? призмы, антипризмы, полиэдры Архимеда. Рассмотрение этих трех групп. Неправильные полиэдры. Общее возможное число выпуклых неправильных полиэдров равно 92. У всех неправильных полиэдров грани представляют собой правильные многоугольники, но все они имеют вершины двух и более типов. Неправильные полиэдры особенно важны в химии соединений с нечетными координационными числами ? 5, 7,. 9, 11. Группы неправильных полиэдров ? пирамиды, бипирамиды, одношапочные призмы, двухшапочные призмы, одношапочные антипрпизмы, двухшапочные антипризмы. Сфеноиды и бисфеноиды. Усеченные икосаэдры. Пять особых полиэдров ? двойная тригональная призма, тригональный додекаэдр, сфенокорона, капированная сфенокорона, сфеномегакорона.

Тема 3. Характеристика координационных полиэдров

"Химические" координационные полиэдры. Есть некоторые различия между классическими полиэдрами и набюдаемым расположением донорных атомов в комплексах. Эти различия возникают вследствие 1) искажений за счет неодинакового размера граней 2)превращений несферических полиэдров в сферические 3) образованием дополнительных полиэдров 5)искажений за счет хелатных групп 5)искажений за счет малой длины связи. Геометрические последствия неэквивалентности вершин. Превращение несферических полиэдров в сферические. Искажения, обусловленные хелатированием. Описание моноядерных соединений (комплексов) с координационными числами 5-12

Тема 4. Описание моноядерных комплексов с координационными числами 5-12.

Семикоординационные соединения. Шесть симметричных структур ? одношапочнй октаэдр, одношапочная тригональная призма, пентагональная бипирамида, тригональная призма с капированной треугольной гранью, гексагональная пирамида, плоский семиугольник . Восьмикоординационные соединения. Восьмикоординационные соединения. Семь симметричных структур - квадратная антипризма, тригональный додекаэдр, куб, двойная тригональная призма, гексагональная бипирамида, капированная по треугольным граням тригональная призма. Девятикоординационные соединения. Трехшапочная тригональна призма, дношапочная квадратная антипризма, одношапочный куб,. трижды усеченный икосаэдр, тригональный сфеноид.

Десятикординационные соединения. Двухшапочная квадратная антипризма, сфенокорона, четырехшапочная тригональная призма, пентагональная антипризма, двухшапочный куб,. пентагональная призма, одношапочный трижды усеченный икосаэдр.

Двенадцатикоордингационные соединения. Икосаэдр, двухшапочная пентагональная призма, антикубооктаэдр, кубооктаэдр, гексагональная антипризма, гексагональная призма, усеченный тетраэдр, квадратный сфеноид.

Тема 5. Метод молекулярной механики. Модель Дашевского-Плямоватого

Метод молекулярной механики. Модель Дашевского-Плямоватого.

Механическая модель молекулы. Молекулярная механика представляет собой эмпирический расчетный метод, в котором молекула рассматривается как система взаимодействующих атомов. Согласно приближению Борна-Оппенгеймера, обычно применяемому в квантовой механике, уравнение Шредингера для молекулы можно разделить на две части, каждая из которых описывает движение электронов и ядер, соответственно, и оба вида движения можно рассматривать независимо друг от друга. В молекулярной механике и колебательной спектроскопии применяется следующий подход: изучается движение ядер, а электроны в явном виде не рассматриваются. В такой модели электронные представления присутствуют неявно, либо вовсе отсутствуют, и энергия молекулы в основном электронном состоянии представляет собой функцию ее ядерных координат. Указанный метод известен также как метод атом-атомных потенциальных функций, аддитивная модель межатомных взаимодействий, метод молекулярного силового поля, механическая модель молекулы и т. п. . Мы будем пользоваться термином "метод молекулярной механики" (МММ).

Тема 6. Атом-атом потенциалы. Приближение парной аддитивности

Молекулярная механика-один из наиболее мощных методов, применяющихся в настоящее время для изучения пространственного строения молекул, оценки энергии внутри- и межмолекулярных взаимодействий и связанных с ними свойств. Он широко используется в органической химии для решения различных структурных и конформационных задач, расчета энергии напряжения, термохимических свойств, частот колебательных спектров, предсказания скоростей химических реакций и их стереохимических особенностей и т. п.

МММ использует для поверхности Борна-Оппенгеймера эмпирически выведенную систему уравнений, математическая форма которых заимствована из классической механики. Эта система потенциальных функций, называемая силовым полем, содержит некоторые варьируемые параметры, численное значение которых выбирается оптимальным образом так, чтобы получить наилучшее согласие рассчитанных и экспериментальных характеристик

молекулы, как, например, геометрическое строение, конформационные энергии, теплоты образования и т. п.. Метод использует одно общее допущение о возможности переноса соответствующих параметров и силовых постоянных из одной молекулы в другую.

Атом-атом потенциалы возникли как способ описания взаимодействия благородных газов, а затем и многоатомных молекул. Применение атом-атом потенциалов в конформационном анализе основано на предположении, что внутримолекулярные взаимодействия носят тот же характер, то и межмолекулярные. Расчеты равновесных конформаций молекул базируются на приближении парной аддитивности. Это приближение оправдано, так как в большинстве случаев роль уже тройных взаимодействий составляет не более 15-20% энергии парных взаимодействий.

Тема 7. Торсионные потенциалы. Равновесие конформеров

В рамках молекулярной механики, базирующейся на вандерваальсовых взаимодействиях, для воспроизведение барьеров вращения достаточно ввести только один дополнительный параметр - торсионную энергию.Считается, что эта часть стерической энергии возникает вследствие отталкивания между связями, не учтенного вандерваальсовым взаимодействием. Имеется и другая точка зрения: торсионная энергия является поправкой на анизотропию вандерваальсова отталкивания.

Тема 8. Метод парамагнитного двулучепреломления

Метод парамагнитного двулучепреломления наиболее информативен при исследовании состава и стереохимии металлокомплексов, состоящих из частиц двух видов, одни из которых имеют значительную анизотропию парамагнитной восприимчивости и малую анизотропию поляризуемости (например, парамагнитные акваионы), а другие обладают близкой к нулевой магнитной анизотропией, но анизотропия их оптической поляризуемости велика. По отдельности для каждой из частиц постоянные двулучепреломления должны быть малы. Лишь возникновение ассоциатов, обладающих ярко выраженными суммарными свойствами, должно резко увеличить величину эффекта.

Примеры, иллюстрирующие эти положения

Тема 9. Константа Коттона-Мутона и константа парамагнитного двулучепреломления.

наиболее удобно для практического использования при вычислении теоретических констант парамагнитного двулучепреломления. Рассмотрим вначале вопросы применения эффекта Коттона - Мутона (теория которого наиболее хорошо разработана и интерпретация результатов, как правило более определенна).

Изменения констант Коттона-Мутона определяются только смещениями конформационных равновесий и межмолекулярными взаимодействиями. Таким образом, эффект Коттона-Мутона является ценным методом изучения сольватации и ассоциации в растворах диамагнетиков .

Тема 10. Моделирование константы парамагнитного двулучепреломления с помощью метода молекулярной

прямые доказательства парамагнитно-анизотропной природы магнитного двулучепреломления в растворах солей лантаноидов получены при изучении концентрированных и сильно разбавленных растворов нитратов и хлоридов лантаноидов.

Таким образом, мольная константа парамагнитного двулучепреломления mP, зависит от молекулярных магнитоэлектрических параметров-компонентов молекулярных тензоров парамагнитной восприимчивости и электронной поляризуемости.

Эти характеристики тесно связаны с пространственной и электронной структурой молекул и ионов, поэтому эффект парамагнитного двулучепреломления используется в исследованиях химического строения вещества, особенно в сочетании с другими методами, например, ядерной магнитной релаксации и pH-метрии .

Тема 11. Структура монотартратов лантаноидов. Моделирование лигандного скелета

Принято, что лиганд в монотартрате диспрозия(III) тридентатен; длины связей и валентные углы взяты как подходящие средние значения. Оптимизация геометрии исходных структур приводит к трем конформациям. Конформация тартрат-иона в двух из них соответствует гош-расположению карбоксильных групп. В третьей значение лигандного угла близко к 140 градусам.

Тема 12. Учет гидратного окружения, выбор наиболее значимых стартовых структур

Для состояния монотартрата диспрозия(III) в водном растворе наиболее вероятна модель, в которой координационное число диспрозия(III) - 9. При этом практически абсолютно доминируют конформации, в которых конфигурация диспрозия(III) - трехшапочная тригональная призма. Выгодность именно этой конформации обусловлена меньшей торсионной энергией лиганда и меньшей энергией невалентных взаимодействий.

Тема 13. Структурные мотивы цитратов и тартратов переходных элементов.

Монотартрат алюминия существует преимущественно в конформации, в которой тартрато-лиганд координирован двумя карбокси- и одной оксигруппой Для монотартрата алюминия тридентатная координация существенно выгоднее бидентатной. Такая же конформация имеет наименьшую энергию и для комплекса с нользарядной формой лиганда. Моноцитрат алюминия имеет структурный мотив, сходный с монотартратом . координация двух карбокси- и одной оксигруппы.

Тема 14. Биядерные цитраты и тартраты лантаноидов, железа(III), оксованадия(IV), алюминия(III)

Биядерные оксикислотные комплексы p-, d-, f-элементов.

Для биядерных тартратных комплексов железа(III) и алюминия(III) невозможна реализация тетрагональной геометрии в dl- димерах для октаэдрических координационных центров. Образование dl-димера возможно в том случае, если торсионые лигандные углы составляют примерно 60 и 120 градусов. Для иона оксованадия(IV) с квадратно-пирамидальным окружением возможна тетрагональная геометрия в dl- димере и тригонально-бипирамидальная в dd-димере.

Тема 15. Стереоэффекты образования тартратных комплексов

При изучении систем, содержащих различные стереоизомеры лиганда, возможно проявление стереоселективных и стереоспецифических эффектов . Стереоселективными следует называть такие процессы, в которых реагент способен отбирать один из нескольких пространственных изомеров, а стереоспецифическими те, в которых образуется только один из пространственных изомеров продукта реакции.

Тема 16. Основные струкуры тетраядерных цитратов и тартратов. Выбор модели координационной сферы

Тетраядерные оксикислотные комплексы p-, d-, f-элементов. Возможность существования кольцевых и открыто-цепных структур. Необходимость учета гидроксо- и кислородных мостиков в случае комплексов алюминия(III), галлия(III), титана(IV).

Основные структуры тетраядерных цитратов и тартратов. Выбор модели координационной сферы лантаноида.

Тема 17. Стереоэфекты в образовании тетраядерных тартратных комплексов

Стереоэфекты в образовании тетраядерных тартратных комплексов. Основные составляющие подхода к моделированию структуры комплекса: учет гидратного окружения ионов металлов; конформационное поведение лигандного скелета; образование ионных ассоциатов, внутрикомплексных водородных связей; задание параметров, учитывающих стереохимические требования иона металла.

Тема 18. Основные составляющие подхода к моделированию структуры комплекса

Подход к построению модели состояния конформационно-нежесткого комплекса в растворе должен включать учет следующих моментов: моделирование гидратного окружения ионов металлов, конформационное поведение лигандного скелета, образование ионных ассоциатов, внутрикомплексных водородных связей, 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 науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

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)

Компьютерная литература - http://www.ph4s.ru/books_pc.html

Лабораторная работа №3 по курсу Компьютерная химия - http://mnmashkin.narod.ru/compchem/3lkh.pdf

Лекция 7: Принципы молекулярной механики - http://hpc.mipt.ru/wp-content/uploads/2012/05/Lecture07.pdf

Молекулярная механика комплексов металлов - http://www.chem.msu.ru/rus/events/lomonosov/3.html

Структурно нежесткие соединния- Леменовский Д.А. - http://www.pereplet.ru/obrazovanie/stsoros/859.html

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

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	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.
самостоя-тельная работа	Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает: - 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. 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.
зачет	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.

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.

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 "Химия".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.15.03 Структура конформационно-нежестких полиядерных комплексов

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2024

Основная литература:

1. Щербина, А. Э. Органическая химия. Основной курс.: учебник / А.Э. Щербина, Л.Г. Матусевич; Под ред. А.Э. Щербины. - Москва : НИЦ ИНФРА-М; Минск : Нов. знание, 2013. - 808 с.: ил.; . - (Высшее образование: Бакалавриат). ISBN 978-5-16-006956-2. - Текст : электронный. - URL: https://znanium.com/catalog/product/415732 (дата обращения: 06.02.2024). - Режим доступа: по подписке.

2. 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: 06.02.2024). - Режим доступа: по подписке.

Дополнительная литература:

1.Бакстон, Шейла 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.

2. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. - 5-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 522 с. - ISBN 978-5-93208-518-9. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/172254 (дата обращения: 06.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

3. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек .- Казань: [Казанский университет], 2013 . ; 20.[Ч. 1]: Компьютерное представление химических структур . - 2013 . - 173 с.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.15.03 Структура конформационно-нежестких полиядерных комплексов

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

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2024

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.