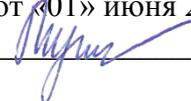


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол № 11 от «01» июня 2018 г.
Зав. кафедрой  /Мустафин А.Г.

Согласовано:
Председатель УМК химического факультета
 /Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Дисциплина
Б1.В.ДВ.01.01 Методы математического моделирования в химии

Вариативная часть, дисциплина по выбору

программа магистратуры

Направление подготовки (специальность).
04.04.01. Химия

Направленность (профиль) подготовки
Физическая химия

Квалификация
Магистр

| | |
|---|---|
| Разработчик (составитель) к.х.н., доцент Насретдинова Р.Н. |  /Насретдинова Р.Н. подпись |
|---|---|

Для приема: 2018 г.

Уфа 2018г.

Составитель: к.х.н., доцент Насретдинова Р.Н.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 11 от «01» июня 2018 г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины (обновлены перечень основной и дополнительной литературы и лицензионное программное обеспечение, необходимое для освоения дисциплины), приняты на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 6 от 22.04.2019 г.

Заведующий кафедрой

 / Мустафин А.Г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры _____, протокол № ____ от « ____ » _____ 20 _ г.

Заведующий кафедрой

_____ / _____ Ф.И.О./

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры _____, протокол № ____ от « ____ » _____ 20 _ г.

Заведующий кафедрой

_____ / _____ Ф.И.О./

Список документов и материалов

| | |
|--|----|
| 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы | 4 |
| 2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы | 7 |
| 3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся) | 7 |
| 4. Фонд оценочных средств по дисциплине | 8 |
| 4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах информирования, описание шкал оценивания | 8 |
| 4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций | 15 |
| 4.3. Рейтинг-план дисциплины (при необходимости) | 30 |
| 5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины | 30 |
| 5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины | 30 |
| 5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины | 32 |
| 6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине | 33 |

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы
(с ориентацией на карты компетенций)

В результате освоения образовательной программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

| Результаты обучения | | Формируемая компетенция (с указанием кода) | Примечание |
|---------------------|---|---|------------|
| Знания | Знать: методы абстрактного мышления при установлении истины, методы научного исследования путём мысленного расчленения объекта (анализ) и путём изучения предмета в его целостности, единстве его частей (синтез) Знать: основные законы химии | ОК-1 способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу | |
| | Знать: содержание процессов самоорганизации и самообразования, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности. | ОК-3 готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала | |
| | Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин | ОПК-1 способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач. | |
| | Знать: основные источники информации для решения задач профессиональной сферы деятельности Знать: основы информационных технологий, основные возможности и правила работы со стандартными программными продуктами при решении профессиональных задач | ОПК-2 владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации | |
| | Знать: научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации. Знать: основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР. | ПК-1 способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты | |
| | Знать: оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ. | ПК-3 готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований | |
| | Знать: основные правила ведения научной дискуссии Знать: Основные требования к стендовым/устным докладам при представлении полученных результатов НИР | ПК-4 способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной | |

| | | | |
|--------|---|---|--|
| | | печати) | |
| | Знать: основные возможные проблемы своей профессиональной деятельности Знать: пути решения возникающих проблем | ПК-6 способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности | |
| | Знать: основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ. | ПК-7 владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования | |
| Умения | Уметь: с использованием методов абстрактного мышления, анализа и синтеза анализировать альтернативные варианты решения исследовательских задач Уметь: Анализировать получаемые экспериментальные результаты и делать соответствующие выводы. | ОК-1 способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу | |
| | Уметь: планировать цели и устанавливать приоритеты при выборе способов принятия решений с учетом условий, средств, личностных возможностей и временной перспективы достижения; осуществления деятельности. Уметь: самостоятельно строить процесс овладения информацией, отобранной и структурированной для выполнения профессиональной деятельности. | ОК-3 готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала | |
| | Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин Уметь: решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам | ОПК-1 способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач. | |
| | Уметь: проводить первичный поиск информации для решения профессиональных задач Уметь: применять стандартное программное обеспечение при решении химических и материаловедческих задач, при подготовке научных публикаций и докладов | ОПК-2 владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации | |
| | Уметь: на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа Уметь: правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике | ПК-1 способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты | |
| | Уметь: проводить эксперимент на научном | ПК-3 готовностью использовать | |

| | | | |
|---------------------------------------|--|---|--|
| | оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ. | современную аппаратуру при проведении научных исследований | |
| | Уметь: высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге (студент-студент, студент-преподаватель, студент-сотрудник лаборатории). Уметь: выделять главные результаты при подготовке к стендовым/устным докладам. | ПК-4 способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) | |
| | Уметь: выявлять возникающие проблемы и осуществлять их разбор с целью поиска путей их решения Уметь: выделять главные проблемы при исполнении своей профессиональной деятельности | ПК-6 способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности | |
| | Уметь: на основе учебной литературы выделять главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач для проведения семинарских занятий Уметь: правильно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета. | ПК-7 владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования | |
| Владения (навыки / опыт деятельности) | Владеть: системой навыков использования абстрактного мышления при решении проблем, возникающих при выполнении исследовательских работ Владеть: Навыками выражать сделанные выводы в доступной для понимания форме | ОК-1 способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу | |
| | Владеть: приемами саморегуляции эмоциональных и функциональных состояний при выполнении профессиональной деятельности Владеть: технологиями организации процесса самообразования; приемами целеполагания во временной перспективе, способами планирования, организации, самоконтроля и самооценки деятельности. | ОК-3 готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала | |
| | Владеть: навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам | ОПК-1 способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач. | |
| | Владеть: навыками работы с научными и образовательными порталами Владеть: базовыми навыками применения стандартного программного обеспечения для обработки результатов исследований и представления их научному сообществу | ОПК-2 владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации | |
| | Владеть: начальными навыками в | ПК-1 способностью проводить | |

| | | | |
|--|---|---|--|
| | формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований. Владеть: навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации | научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты | |
| | Владеть: основами пробоподготовки для проведения различных ФХА. Владеть: начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием | ПК-3 готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований | |
| | Владеть: владеть навыками участия в многосторонней научной беседе, используя в устной речи специфическую химическую терминологию | ПК-4 способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) | |
| | Владеть: способностью к определению и анализу проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности | ПК-6 способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности | |
| | Владеть: навыками в отборе материала для проведения практических занятий и лабораторных работ по результатам анализа литературных данных. | ПК-7 владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования | |

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Целями освоения дисциплины "Методы математического моделирования в химии" является формирование компетенций связанных с:

знанием основных положений статистического анализа данных, постулатов реакционной способности, корреляционного анализа, квантовой химии;

формированием и развитием у студентов основы химического мышления;

выработкой навыков оценки свойств молекулярных систем различными эмпирическими методами, решения прямой и обратной задач химической кинетики, использования неэмпирических и полуэмпирических методов изучения электронного строения атомов и молекул.

Дисциплина «Методы математического моделирования в химии» относится к вариативной части.

Дисциплина изучается на 1 году обучения во 1 семестре.

Особенностью курса является активное использование и углубление тех знаний, которые студенты приобретают при изучении предшествующих курсов, включая многие разделы химической термодинамики, химической кинетики и катализа, квантовой механики и квантовой химии.

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Код и формулировка компетенции

ОК-1 способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу.

| Уровень освоения компетенции | Планируемые результаты обучения | Критерии оценивания результатов обучения | |
|------------------------------|---|---|--|
| | | не зачтено | зачтено |
| Первый этап (уровень) | Знать: методы абстрактного мышления при установлении истины, методы научного исследования путём мысленного расчленения объекта (анализ) и путём изучения предмета в его целостности, единстве его частей (синтез) | Фрагментарные знания методов абстрактного мышления, анализа и синтеза при решении исследовательских и практических задач | Сформированные систематические знания методов абстрактного мышления, анализа и синтеза при решении исследовательских и практических задач |
| | Знать: основные законы химии | Ошибается в основных законах химии | Полностью знает и понимает основные законы химии |
| Второй этап (уровень) | Уметь: с использованием методов абстрактного мышления, анализа и синтеза анализировать альтернативные варианты решения исследовательских задач | Частично освоенное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских задач | Сформированное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских задач |
| | Уметь: анализировать получаемые экспериментальные результаты и делать соответствующие выводы. | Не способен делать соответствующие выводы при анализе экспериментальных данных | Способен самостоятельно анализировать получаемые экспериментальные результаты и делать соответствующие выводы |
| Третий этап (уровень) | Владеть: системой навыков использования абстрактного мышления при решении проблем, возникающих при выполнении исследовательских работ | Фрагментарное применение навыков методологического использования абстрактного мышления при решении проблем, возникающих при выполнении исследовательских работ, самостоятельного мышления | Успешное и систематическое применение навыков методологического использования абстрактного мышления при решении проблем, возникающих при выполнении исследовательских работ, самостоятельного мышления |
| | Владеть: Навыками выражать сделанные выводы в доступной для понимания | Не способен выразить сделанные выводы в доступной для | Четко и логически обоснованно формулирует сделанные выводы |

| | | | |
|--|-------|-----------------|--|
| | форме | понимания форме | |
|--|-------|-----------------|--|

Код и формулировка компетенции

ОК-3 готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала.

| Уровень освоения компетенции | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Критерии оценивания результатов обучения | |
|------------------------------|--|---|--|
| | | не зачтено | зачтено |
| Первый этап (уровень) | Знать: содержание процессов самоорганизации и самообразования, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности. | Допускает существенные ошибки при раскрытии содержания и особенностей процессов самоорганизации и самообразования. | Владеет полной системой знаний о содержании, особенностях процессов самоорганизации и самообразования, аргументированно обосновывает принятые решения при выборе технологий их реализации с учетом целей профессионального и личностного развития. |
| Второй этап (уровень) | Уметь: планировать цели и устанавливать приоритеты при выборе способов принятия решений с учетом условий, средств, личностных возможностей и временной перспективы достижения; осуществления деятельности. | Имея базовые знания о способах принятия решений при выполнении конкретной профессиональной деятельности, не способен устанавливать приоритеты при планировании целей своей деятельности. | Готов и умеет формировать приоритетные цели деятельности, давая полную аргументацию принимаемым решениям при выборе способов выполнения деятельности. |
| | Уметь: самостоятельно строить процесс овладения информацией, отобранной и структурированной для выполнения профессиональной деятельности. | Зная содержание процесса обучения, не умеет самостоятельно отбирать и систематизировать подлежащую усвоению информацию, выбирать методы и приемы организации своей познавательной деятельности. | Умеет строить процесс самообразования с учетом внешних и внутренних условий реализации. |
| Третий этап (уровень) | Владеть: приемами саморегуляции эмоциональных и функциональных состояний при выполнении профессиональной деятельности | Владеет информацией об отдельных приемах саморегуляции, но не умеет реализовывать их в конкретных ситуациях. | Демонстрирует обоснованный выбор приемов саморегуляции при выполнении деятельности в условиях неопределенности. |
| | Владеть: технологиями организации процесса | Владеет отдельными приемами | Демонстрирует возможность переноса технологии |

| | | | |
|--|--|--|---|
| | самообразования; приемами целеполагания во временной перспективе, способами планирования, организации, самоконтроля и самооценки деятельности. | самоорганизации образовательного процесса, но допускает существенные ошибки при их реализации, не учитывает временных перспектив развития профессиональной деятельности. | организации процесса самообразования, сформированной в одной сфере деятельности, на другие сферы, полностью обосновывая выбор используемых методов и приемов. |
|--|--|--|---|

Код и формулировка компетенции

ОПК-1 способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач.

| Уровень освоения компетенции | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Критерии оценивания результатов обучения | |
|------------------------------|--|---|--|
| | | не зачтено | зачтено |
| Первый этап (уровень) | Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин | Затрудняется в определении базовых понятий и формулировке основных законов химии | Имеет четкое, целостное представление о содержании основных химических курсов и общих закономерностях химических процессов, изучаемых в рамках основных химических дисциплин |
| Второй этап (уровень) | Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин | Не умеет классифицировать вещества, составлять структурные и пространственные формулы основных классов органических и неорганических соединений, называть вещества в соответствии с номенклатурой ИЮПАК | Умеет прогнозировать результаты несложных последовательностей химических реакций с учетом общих закономерностей процессов, изучаемых в рамках основных химических дисциплин |
| | Уметь: решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам | Не умеет решать типовые задачи из базовых курсов химии, но допускает отдельные ошибки | Умеет решать задачи повышенной сложности из базовых курсов химии |
| Третий этап (уровень) | Владеть: навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам | Не владеет навыками поиска учебной литературы, в т.ч. с использованием электронных ресурсов | Владеет навыками критического анализа учебной информации по основным разделам химии, формулировки выводов и участия в дискуссии по учебным вопросам |

Код и формулировка компетенции

ОПК-2 владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации.

| Уровень освоения компетенции | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Критерии оценивания результатов обучения | |
|------------------------------|---|--|---|
| | | не зачтено | зачтено |
| Первый этап (уровень) | Знать: основные источники информации для решения задач профессиональной сферы деятельности | Знает названия нескольких основных российских научных и образовательных порталов по химии | Знает структуру и содержание основных российских и международных научных и образовательных порталов по химии, правила составления поисковых запросов |
| | Знать: основы информационных технологий, основные возможности и правила работы со стандартными программными продуктами при решении профессиональных задач | Знает устройство компьютера, но плохо понимает назначение его основных рабочих узлов | Знает основные правила и приемы составления библиографических баз данных с использованием стандартного программного обеспечения |
| Второй этап (уровень) | Уметь: проводить первичный поиск информации для решения профессиональных задач | Испытывает затруднения в последовательности операций и составлении поискового запроса | Умеет находить общую информацию для решения профессиональных задач |
| | Уметь: применять стандартное программное обеспечение при решении химических и материаловедческих задач, при подготовке научных публикаций и докладов | Умеет использовать отдельные функции наиболее распространенных программных продуктов при обработке экспериментальных данных и подготовке научных публикаций и докладов, но допускает грубые ошибки | Умеет использовать несколько программных продуктов для обработки экспериментальных данных и подготовки научных публикаций и докладов |
| Третий этап (уровень) | Владеть: навыками работы с научными и образовательными порталами | Затрудняется в поиске профессиональной информации в сети Интернет | Владеет навыками получения общей научно-технической информации в сети Интернет |
| | Владеть: базовыми навыками применения стандартного программного обеспечения для обработки результатов исследований и представления их научному сообществу | Способен использовать стандартное программное обеспечение для обработки результатов исследований и подготовки презентаций при непосредственной помощи сотрудника более высокой квалификации | Способен в сжатые сроки освоить новое программное обеспечение под руководством специалиста более высокой квалификации, способен подготовить тезисы доклада и презентацию по заданной теме при наличии шаблона |

Код и формулировка компетенции:

ПК-1 способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты

| Уровень освоения компетенции | Планируемые результаты обучения | Критерии оценивания результатов обучения | |
|------------------------------|---|--|--|
| | | не зачтено | зачтено |
| Первый этап (уровень) | Знать: научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации. | Затрудняется в определении научной новизны и практической значимости полученных данных | Знает научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении НИР |
| | Знать: основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР. | Затрудняется в выборе литературы по тематике исследования. Плохо ориентируется в преимуществах и недостатках экспериментальных методов | Уверенно выбирает литературу по тематике исследования, знает преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР. |
| Второй этап (уровень) | Уметь: на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа | Затрудняется в выделении теоретической основы экспериментальных методов используемых в НИР | Самостоятельно определяет теоретическую основу экспериментальных методов НИР с привлечением литературы |
| | Уметь: правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике | Затрудняется в составлении конспекта | Правильно составляет конспекты, самостоятельно выделяет главные положения предшествующих работ |
| Третий этап (уровень) | Владеть: начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований. | Затрудняется в проведении первичного литературного анализа в выбранной области исследований | Способен формулировать тематику НИР по результатам литературного анализа в выбранной области исследований. |
| | Владеть: навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации | Затрудняется в проведении экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР диссертации | Показывает уверенное владение навыками экспериментальных и теоретических работах по теме НИР диссертации |

Код и формулировка компетенции:

ПК-3 готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований

| Уровень освоения компетенции | Планируемые результаты обучения | Критерии оценивания результатов обучения | |
|------------------------------|---|---|--|
| | | не зачтено | зачтено |
| Первый этап (уровень) | Знать: оборудование и программы предназначенные для | Затрудняется в определении и назначении компонентов | Самостоятельно подключает компоненты приборов. Имеет представления о |

| | | | |
|-----------------------|--|--|--|
| | проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ. | прибора и программ. | нормальном и критическом режимах их функционирования. Способен диагностировать простые ошибки приборов и программ управления |
| Второй этап (уровень) | Уметь: проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ. | Затрудняется в проведении эксперимента на научном оборудовании использовании специализированных программ | Самостоятельно осуществляет все этапы эксперимент на научном оборудовании, проводит обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ. |
| Третий этап (уровень) | Владеть: основами пробоподготовки для проведения различных ФХА. | Затрудняется в подготовке проб и объектов для последующего исследования. | Самостоятельно способен осуществить полный цикл пробоподготовки |
| | Владеть: начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием | Затрудняется в порядке включения и выключения прибора, снятии показаний измерений | Способен к проведению полного цикла работ на специализированном научном оборудовании при проведении экспериментов невысокой сложности |

Код и формулировка компетенции:

ПК-4 способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)

| Уровень освоения компетенции | Планируемые результаты обучения | Критерии оценивания результатов обучения | |
|------------------------------|---|---|--|
| | | не зачтено | зачтено |
| Первый этап (уровень) | Знать: основные правила ведения научной дискуссии | Затрудняется в ведении научной дискуссии | Знает основные правила ведения научной дискуссии |
| | Знать: Основные требования к стендовым/устным докладам при представлении полученных результатов НИР | Затрудняется в оформлении результатов НИР по правилам | Знает основные требования к стендовым/устным докладам. |
| Второй этап (уровень) | Уметь: высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге (студент-студент, студент-преподаватель, студент-сотрудник лаборатории). | Затрудняется в высказывании своей точки зрения | Умеет высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге со специалистами различного уровня |
| | Уметь: выделять главные результаты при подготовке к стендовым/устным докладам. | Затрудняется в определении главных результатов исследования | Выделяет главные результаты при подготовке к стендовым/устным докладам |
| Третий этап (уровень) | Владеть: владеть навыками участия в многосторонней научной беседе, используя в | Затрудняется в использовании терминологии | Владеет навыками участия в научной беседе, свободно использует |

| | | | |
|--|---|--|---------------------------------------|
| | устной речи специфическую химическую терминологию | | специфическую химическую терминологию |
|--|---|--|---------------------------------------|

Код и формулировка компетенции:

ПК-6 способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности

| Уровень освоения компетенции | Планируемые результаты обучения | Критерии оценивания результатов обучения | |
|------------------------------|---|---|--|
| | | не зачтено | зачтено |
| Первый этап (уровень) | Знать: основные возможные проблемы своей профессиональной деятельности | Затрудняется в формулировании возможных проблем | Знает основные возможные проблемы своей профессиональной деятельности |
| | Знать: пути решения возникающих проблем | Затрудняется в формулировании путей решения возникающих проблем | Знает пути решения возникающих проблем |
| Второй этап (уровень) | Уметь: выявлять возникающие проблемы и осуществлять их разбор с целью поиска путей их решения | Затрудняется в выявлении возникающих проблем | Умеет выявлять возникающие проблемы и осуществлять их разбор с целью поиска путей их решения |
| | Уметь: выделять главные проблемы при исполнении своей профессиональной деятельности | Затрудняется в выделении главных проблем | Уметь выделять главные проблемы при исполнении своей профессиональной деятельности |
| Третий этап (уровень) | Владеть: способностью к определению и анализу проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности | Затрудняется в определении возникающих проблем | Владеет способностью к определению и анализу проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности |

Код и формулировка компетенции:

ПК-7 владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования

| Уровень освоения компетенции | Планируемые результаты обучения | Критерии оценивания результатов обучения | |
|------------------------------|---|---|--|
| | | не зачтено | зачтено |
| Первый этап (уровень) | Знать: основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ. | Не способен грамотно подобрать основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ. | Знает основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ |
| Второй этап (уровень) | Уметь: на основе учебной литературы выделять главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач | Не способен грамотно на основе учебной литературы выделять главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, | Умеет на основе учебной литературы выделять главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач |

| | | | |
|-----------------------|---|---|--|
| | для проведения семинарских занятий | обладать навыками подбора и решения задач для проведения семинарских занятий. | для проведения семинарских занятий. |
| | Уметь: правильно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета. | Не способен грамотно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета. | Умеет правильно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета. |
| Третий этап (уровень) | Владеть: навыками в отборе материала для проведения практических занятий и лабораторных работ по результатам анализа литературных данных. | Не способен грамотно отбирать материал для проведения практических занятий и лабораторных работ по результатам анализа литературных данных. | Способен грамотно отобрать материал для проведения практических занятий и лабораторных работ по результатам анализа литературных данных. |

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

| Этапы освоения | Результаты обучения | Компетенция | Оценочные средства |
|--------------------|---|--|--|
| 1-й этап Знания | Знать: методы абстрактного мышления при установлении истины, методы научного исследования путём мысленного расчленения объекта (анализ) и путём изучения предмета в его целостности, единстве его частей (синтез) Знать: основные законы химии | ОК-1 способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Знать: содержание процессов самоорганизации и самообразования, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности. | ОК-3 готовность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин | ОПК-1 способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач. | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Знать: основные источники информации для решения задач профессиональной сферы деятельности Знать: основы | ОПК-2 владение современными компьютерными технологиями при планировании | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |

| | | | |
|--------------------|---|--|--|
| | информационных технологий, основные возможности и правила работы со стандартными программными продуктами при решении профессиональных задач | исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации | |
| | Знать: научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации. Знать: основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР. | ПК-1 способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Знать: оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ. | ПК-3 готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Знать: основные правила ведения научной дискуссии Знать: Основные требования к стендовым/устным докладам при представлении полученных результатов НИР | ПК-4 способность участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Знать: основные возможные проблемы своей профессиональной деятельности Знать: пути решения возникающих проблем | ПК-6 способность определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Знать: основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ. | ПК-7 владение методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| 2-й этап Умения | Уметь: с использованием методов абстрактного мышления, анализа и синтеза анализировать альтернативные варианты решения исследовательских задач Уметь: Анализировать получаемые экспериментальные | ОК-1 способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |

| | | | |
|--|---|--|--|
| | результаты и делать соответствующие выводы. | | |
| | Уметь: планировать цели и устанавливать приоритеты при выборе способов принятия решений с учетом условий, средств, личностных возможностей и временной перспективы достижения; осуществления деятельности. Уметь: самостоятельно строить процесс овладения информацией, отобранной и структурированной для выполнения профессиональной деятельности. | ОК-3 готовность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин Уметь: решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам | ОПК-1 способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач. | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Уметь: проводить первичный поиск информации для решения профессиональных задач Уметь: применять стандартное программное обеспечение при решении химических и материаловедческих задач, при подготовке научных публикаций и докладов | ОПК-2 владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Уметь: на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа Уметь: правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике | ПК-1 способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Уметь: проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием | ПК-3 готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |

| | | | |
|-----------------------------------|--|--|---|
| | специализированных компьютерных программ. | | |
| | Уметь: высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге (студент-студент, студент-преподаватель, студент-сотрудник лаборатории). Уметь: выделять главные результаты при подготовке к стендовым/устным докладам. | ПК-4 способность участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Уметь: выявлять возникающие проблемы и осуществлять их разбор с целью поиска путей их решения Уметь: выделять главные проблемы при исполнении своей профессиональной деятельности | ПК-6 способность определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Уметь: на основе учебной литературы выделять главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач для проведения семинарских занятий Уметь: правильно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета. | ПК-7 владение методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| 3-й этап Владеть навыкам и | Владеть: системой навыков использования абстрактного мышления при решении проблем, возникающих при выполнении исследовательских работ Владеть: Навыками выражать сделанные выводы в доступной для понимания форме | ОК-1 способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, реферат, зачет |
| | Владеть: приемами саморегуляции эмоциональных и функциональных состояний при выполнении профессиональной деятельности Владеть: технологиями организации процесса самообразования; приемами целеполагания во временной перспективе, способами планирования, организации, самоконтроля и самооценки деятельности. | ОК-3 готовность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Владеть: навыками работы с учебной литературой по | ОПК-1 способностью использовать и развивать | Письменная работа на занятии, |

| | | | |
|--|--|--|--|
| | основным химическим дисциплинам | теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач. | индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Владеть: навыками работы с научными и образовательными порталами Владеть: базовыми навыками применения стандартного программного обеспечения для обработки результатов исследований и представления их научному сообществу | ОПК-2 владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Владеть: начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований. Владеть: навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации | ПК-1 способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Владеть: основами пробоподготовки для проведения различных ФХА. Владеть: начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием | ПК-3 готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Владеть: владеть навыками участия в многосторонней научной беседе, используя в устной речи специфическую химическую терминологию | ПК-4 способность участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Владеть: способностью к определению и анализу проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности | ПК-6 способность определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |
| | Владеть: навыками в отборе материала для проведения практических занятий и лабораторных работ по результатам анализа литературных данных. | ПК-7 владение методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего | Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет |

Вопросы для индивидуального / группового опроса и коллоквиума

Вопросы к занятию 1. Измерения и обработка измерений. Теория ошибок. Учет систематических погрешностей: поправочные коэффициенты. Статистический учет случайных погрешностей. Дисперсия и средняя квадратическая погрешность. Доверительный интервал и доверительная вероятность. Критерий Стьюдента. Учет промахов. Метод σ . Метод относительного уклонения. Уровень значимости.

Вопрос к занятию 2. Регрессионный анализ. Физико-химические дескрипторы и их расчет. Корреляционные соотношения в органической химии. Важнейшие соотношения и постулаты: принцип линейного соотношения свободных энергий, постулат Хэммонда, принцип Поляни-Семенова.

Вопросы к занятию 3. Уравнение Гаммета, его достоинства и недостатки. Уравнение Тафта. Взаимосвязь различных шкал заместителей. Учет стерического эффекта. Множественные корреляции.

Вопросы к занятию 4. Математический аппарат при моделировании кинетических процессов. Кинетический анализ сложных химических реакций. Скорость и механизм химической реакции. Кинетическое уравнение его дифференциальная и интегральная форма, порядок химической реакции. Сложные процессы: обратимые, параллельные и последовательные реакции. Квазиравновесное и квазистационарное приближения в кинетике сложных реакций. Лимитирующая стадия. Кинетический анализ сложных реакций. Прямая и обратная кинетические задачи. Примеры

Вопросы к занятию 5. Аддитивные методы расчета физико-химических свойств органических молекул.

Принцип аддитивности. Его применение в различных областях химии. Обоснование применимости метода аддитивности.

Метод аддитивности термодинамических вкладов Бенсона. Термодинамическая группа. Типы центральных атомов и лигандов. Примеры простых расчетов. Невалентные взаимодействия, их классификация и учет в методе Бенсона. Расчет изобарной теплоемкости и энтропии органических соединений. Число симметрии. Расчеты энтальпии образования для произвольной температуры.

Вопросы к занятию 6. Сравнительные методы расчета.

Метод гомологических рядов.

Соотношения между энтальпиями образования различных гомологических рядов. Примеры простых соотношений. Вывод уравнений множественной регрессии и конкретные примеры.

Вопросы к занятию 7. Метод изодесмических реакций. Принцип подобия в термодинамических расчетах. Изодесмические реакции. Реакции разделения связей и их формальный подбор. Гомодесмические реакции. Величина теплового эффекта гомодесмической реакции как критерий стабилизации/дестабилизации участников реакции. Методы подбора гомодесмических реакций. Обмен заместителями. Макроинкрементирование. Реакции разделения групп. Примеры.

Вопросы к занятию 8. Математический аппарат квантовой химии.

Основы квантовохимической теории. Уравнение Шредингера для атомов и молекул.

Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронное

волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле.

Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока (самосогласованного поля, ССП). Детерминант Слэтера. Понятие о закрытых и открытых оболочках.

Вопросы к занятию 9. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа. Минимальные и валентно-расщепленные базисные наборы. Поляризационные и диффузные функции. Метод ССП МО ЛКАО.

Вопросы к занятию 10. Вычислительные методы квантовой химии.

Полуэмпирические методы квантовой химии. Методы, использующие пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием: MNDO, AM1, PM3. Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии.

Применение полуэмпирических методов к расчету различных свойств органических молекул.

Вопросы к занятию 11. Коррелированное движение электронов. Учет энергии электронной корреляции. Понятие о методах конфигурационного взаимодействия, объединенных кластеров. Основные понятия метода теории возмущений, теория Меллера-Плессе. Сравнительная характеристика методов учета корреляционной энергии. Теория функционала плотности, основные понятия. Метод Кона-Шэма. Различные виды корреляционных и обменных функционалов. Гибридные методы.

Вопросы к занятию 12. Расчет свойств органических молекул.

Полное конфигурационное взаимодействие. Совершенный базисный набор. Ограничения, вызванные усложнением метода расчета.

Компромиссные подходы. Метод изодесмических реакций в сочетании со сложным методом квантовохимического расчета. Семейство методов CBS и их отдельные представители: CBS-APNO, CBS-Q3 и др. Семейство композитных методов Gaussian. Метод G1. Его недостатки и их учет в методе G2. Упрощение метода: процедуры G2MP2, G2M(RCC) и другие. Методы G3 и G4.

Критерии оценки индивидуального и группового опроса:

- «не зачтено» выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом вопросе или имеет о нем фрагментарные представления;
- «зачтено» выставляется студенту, если студент имеет сформированные представления об обсуждаемом вопросе, при этом допускаются отдельные пробелы в представлениях об обсуждаемом вопросе.

Контрольная работа № 1.

Вариант №1

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвленность структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь большую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчетов Z , W и iR оформить в виде таблицы:

| Соединение | W | Z | i _R |
|------------|---|---|----------------|
| | | | |
| | | | |
| | | | |

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии h . Расчёты h сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре ¹H ЯМР приведённых соединений

- (а) уксусная кислота;
- (б) метилформиат;
- (в) гликолевый альдегид.

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена.

4. Укажите положение групп СН₃ в молекуле ксилола, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.

5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

Вариант №2

1. Для следующих углеводов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов Z , W и i_R оформить в виде таблицы:

| Соединение | W | Z | i _R |
|------------|---|---|----------------|
| | | | |
| | | | |

| | | | |
|--|--|--|--|
| | | | |
|--|--|--|--|

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии h . Расчёты h сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре ^1H ЯМР приведённых соединений
- (а) ацетальдегид;
 (б) этиленоксид;
 (в) виниловый спирт.
3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена.
4. Укажите положение групп ОН в молекуле диоксибензола $\text{C}_6\text{H}_4(\text{OH})_2$, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

Вариант №3

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов Z , W и iR оформите в виде таблицы:

| Соединение | W | Z | iR |
|------------|-----|-----|------|
| | | | |
| | | | |
| | | | |

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии h . Расчёты h сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре ^1H ЯМР приведённых соединений
- (а) метилформиат;
 (б) этилформиат;
 (в) n -пропилформиат
3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена.

- Укажите положение групп OH в молекуле диоксибензола $C_6H_4(OH)_2$, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
- Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

Вариант №4

- Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов Z , W и iR оформить в виде таблицы:

| Соединение | W | Z | iR |
|------------|-----|-----|------|
| | | | |
| | | | |
| | | | |

- Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии h . Расчёты h сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре 1H ЯМР приведённых соединений

- (а) метанол;
- (б) этанол;
- (в) *n*-пропанол

- С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом хрома в молекуле дибензолхрома.
- Укажите положение групп OH в молекуле диоксибензола $C_6H_4(OH)_2$, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
- Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

Вариант №5

- Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов,

укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов Z , W и iR оформить в виде таблицы:

| Соединение | W | Z | iR |
|------------|-----|-----|------|
| | | | |
| | | | |
| | | | |

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии h . Расчёты h сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре 1H ЯМР приведённых соединений

- (а) метанол;
- (б) этанол;
- (в) *n*-пропанол

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом хрома в молекуле дибензолхрома.
4. Укажите положение групп OH в молекуле диоксибензола $C_6H_3(OH)_3$, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

Вариант №6

1. Для следующих углеводов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов Z , W и iR оформить в виде таблицы:

| Соединение | W | Z | iR |
|------------|-----|-----|------|
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии h . Расчёты h сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре ^1H ЯМР приведённых соединений

- (a) HCNO;
(б) HNCO;
в) HOCN

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом хрома в молекуле дибензолхрома.
4. Укажите положение групп OH в молекуле диоксибензола $\text{C}_6\text{H}_3(\text{OH})_3$, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

Вариант №7

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов Z , W и iR оформить в виде таблицы:

| Соединение | W | Z | iR |
|------------|-----|-----|------|
| | | | |
| | | | |
| | | | |

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии h . Расчёты h сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре ^1H ЯМР приведённых соединений

- (a) тетраэдран C_4H_4 ;
(б) кубан C_8H_8 ;
(в) призма C_6H_6 .

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом хрома в молекуле дибензолхрома.
4. Укажите положение групп OH в молекуле диоксибензола $\text{C}_6\text{H}_2(\text{OH})_2$, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

Вариант №8

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов Z , W и iR оформите в виде таблицы:

| Соединение | W | Z | iR |
|------------|-----|-----|------|
| | | | |
| | | | |
| | | | |

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии h . Расчёты h сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре 1H ЯМР приведённых соединений

- (а) бензвален;
(б) бензол;
(в) фульвен.

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом хрома в молекуле дибензолхрома.
4. Укажите положение групп OH в молекуле диоксибензола $C_6H_2(OH)_2$, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

Вариант №9

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов Z , W и iR оформите в виде таблицы:

| Соединение | W | Z | iR |
|------------|-----|-----|------|
|------------|-----|-----|------|

| | | | |
|--|--|--|--|
| | | | |
| | | | |
| | | | |

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии h . Расчёты h сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре ^1H ЯМР приведённых соединений

- (а) бензвален;
- (б) бензол;
- (в) фульвен.

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена?
4. Укажите положение групп CH_3 в молекуле ксилола, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

Вариант №10

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов Z , W и iR оформить в виде таблицы:

| Соединение | W | Z | iR |
|------------|-----|-----|------|
| | | | |
| | | | |

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии h . Расчёты h сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре ^1H ЯМР приведённых соединений
 - (а) малеиновый ангидрид;
 - (б) фуран;
 - (в) аддукт малеинового ангидрида и фурана (продукт Дильса-Альдера).
3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена?
4. Укажите положение групп CH_3 в молекуле ксилола, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

Критерии оценки контрольной работы:

- «не зачтено» выставляется студенту, если студент выполнил каждое из заданий на 70% и ниже;
- «зачтено» выставляется студенту, если студент выполнил каждое из заданий как минимум на 70% и выше.

а. Рейтинг-план дисциплины (при необходимости)

Модульно-рейтинговая система при обучении в магистратуре не применяется, поэтому рейтинг–план дисциплины не составлялся.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература:

1. Вершинин, В.И. Аналитическая химия [Электронный ресурс] : учебник / В.И. Вершинин, И.В. Власова, И.А. Никифорова. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 428 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/97670>. — Загл. с экрана.
2. Воскобойников, Ю.Е. Регрессионный анализ данных в пакете MATHCAD [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ю.Е. Воскобойников. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 224 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/666>. — Загл. с экрана.
3. Буданов, В.В. Химическая кинетика [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.В. Буданов, Т.Н. Ломова, В.В. Рыбкин. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 288 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/42196>. — Загл. с экрана.
4. Колпакова, Н.А. Сборник задач по химической кинетике [Электронный ресурс] : учебное пособие / Н.А. Колпакова, С.В. Романенко, В.А. Колпаков. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2018. — 280 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/105991>. — Загл. с экрана.

5. Боровлев, И.В. Органическая химия: термины и основные реакции [Электронный ресурс] : учебное пособие / И.В. Боровлев. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 362 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/70742>. — Загл. с экрана.
6. Реутов, О.А. Органическая химия. В 4 ч. Часть 1 [Электронный ресурс] : учебник / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 570 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94167>. — Загл. с экрана. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 428 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92941>. — Загл. с экрана.
7. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учебное пособие / Майер И. ; под ред. А. Л. Чугреева ; пер. с англ. М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 387 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94102>. — Загл. с экрана.
8. Демидович, Б.П. Математические основы квантовой механики [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.П. Демидович. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2005. — 200 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/604>. — Загл. с экрана.
9. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] / В.И. Крашенинин ; Е.Г. Газенаур ; Л.В. Кузьмина .— Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012 .— 56 с. — Режим доступа: [http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+9+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus](http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+9+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus;); <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>.

Дополнительная литература:

10. Квантовохимическое моделирование органических молекул и реакций. Выбор приближения. [Электронный ресурс]: учеб. пособие / И.В. Вакулин [и др.]; Башкирский государственный университет. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2015. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ возможен через Электронную библиотеку БашГУ. — [URL:https://elib.bashedu.ru/dl/read/Vakulin_Latypova_Talipov_Kvantovohimicheskoe_modelirovanie_up_2015.pdf](https://elib.bashedu.ru/dl/read/Vakulin_Latypova_Talipov_Kvantovohimicheskoe_modelirovanie_up_2015.pdf).
11. Еремин, В.В. Основы физической химии. Теория. В 2 ч [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.В. Еремин, С.И. Каргов, И.А. Успенская, Н.Е. Кузьменко. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 589 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/84118>. — Загл. с экрана.
12. Реутов, О.А. Органическая химия. В 4 ч. Часть 1 [Электронный ресурс] : учебник / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 570 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94167>. — Загл. с экрана.
13. Юровская, М.А. Основы органической химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / М.А. Юровская, А.В. Куркин. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 239 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/66365>. — Загл. с экрана.
14. Син, Т. Занимательная статистика. Регрессионный анализ. Манга [Электронный ресурс] / Т. Син. — Электрон. дан. — Москва : ДМК Пресс, 2014. — 214 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/90123>. — Загл. с экрана.
15. Ю.И. Бродский. Лекции по математическому и имитационному моделированию

Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2015. 240 с. Режим доступа:

http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=429702&sr=1.

16. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.Г. Цирельсон. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>. — Загл. с экрана.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>
3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalogi/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
9. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019
10. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License
11. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

| Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы | Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы | Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа |
|--|---|---|
| <p>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус)</p> <p>2.учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус)</p> <p>3. учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус)</p> <p>4. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория</p> | <p style="text-align: center;">Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 001 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 002 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 006 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 007 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 008 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Читальный зал № 1 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.</p> <p style="text-align: center;">Читальный зал №2 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.</p> <p style="text-align: center;">Читальный зал № 5 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.</p> <p style="text-align: center;">Читальный зал № 6</p> | <p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные</p> <p>2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> <p>3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019</p> <p>4. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU</p> <p>5. LinuxOpenSUSE 12.3 (x84_64) GNUGeneralPublicLicense</p> |

| | | |
|--|--|--|
| <p>№ 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус), аудитория № 004 (химфак корпус), аудитория № 005 (химфак корпус).</p> <p>5. помещения для самостоятельной работы: читальный зал № 1 (главный корпус), читальный зал №2 (физмат корпус-учебное), читальный зал № 5 (гуманитарный корпус), читальный зал № 6 (учебный корпус), читальный зал № 7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 418 (химфак корпус)</p> <p>6. помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования: аудитория № 405 (химфак корпус).</p> | <p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.</p> <p>Читальный зал № 7</p> <p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.</p> <p>Аудитория № 004</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G, персональный компьютер Lenovo ThinkCentre A70z Intel Pentium E 5800, 320 Gb, 19" - 15 шт, шкаф настенный TLK6U.</p> <p>Аудитория № 005</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, компьютер DEPO Neos 470 MDi5_3450/4GDDR/T500 G/DVD+R и монитор ViewSonic 21.5 - 13 шт, шкаф TLK TWP-065442-G-GY, шкаф монтажный NT PRACTIC 2MP47-610B/SSt450/ SKS1/SSt750,59560, 00 T.316-14, шкаф настенный TLK6U.</p> <p>Лаборатория № 418</p> <p>Учебная мебель, факсимильным аппарат Panasonic KX-FL423RUB – 2 шт., эН-метр рН-150МИ (с гос. поверкой), автотрансформатор TDGC2-0.5K(0,5kBT; 2A,220/0-250В),3604, 99р Т.207/2-15, весы "Ohaus" PA64C (65г, 0,1мг) с поверкой, весы VIC-1500d1 (1500г. 100МГ, внешн.калибровка) ACCULAB, иономер И-160МИ с поверкой, комплекс вольтамперометрический СТА, компьютер в комплекте DEPO Neos 4601\Ю/монитор 20" Samsung BX2035/кпав./мышь, компьютер персональный №1 т.210-14/3, магнитная мешалка без нагрева Tolopino – 2шт, магнитная мешалка с нагревом и нанокерамич.поверх hG-MAG HS, метр-рН рН-150МИ (с гос.поверкой), монитор 19" LG L1919S BF Black (LCD<TFT,8ms, 1280*1024,250КД/М.1 400:1,4:3 D-Sub), персональный компьютер в составе с/блок/Core J7-4770 (3.4)/H87/SYGA/HDD 500Gb, монитор ЖК"20"Веnс1.клавиат ура+мышь, принтер Canoni-SENSYSMF3010, рН-метр рН-150МИ с гос.поверкой, системный блок ПК (775), шкаф сушильный LOIPLF-25/350-GS1, (310X 310x310 мм б/вентилятора.нерж.сталь цифровой контролер), количество посадочных мест – 10.</p> | |
|--|--|--|

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины «Методы математического моделирования в химии»
на 1 семестр
очная
форма обучения

| Вид работы | Объем дисциплины |
|---|------------------|
| Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов) | 3/108 |
| Учебных часов на контактную работу с преподавателем: | 26,2 |
| лекций | 12 |
| практических/ семинарских | 14 |
| лабораторных | |
| других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) | 0.2 |
| Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СРС) включая подготовку к экзамену/зачету | 81,8 |
| Контроль | |

Форма(ы) контроля:
Зачет 1 семестр

| № п/п | Тема и содержание | Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах) | | | | Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка) | Задания по самостоятельной работе студентов | Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.) |
|-------|--|--|--------|----|-----|--|--|---|
| | | ЛК | ПР/СЕМ | ЛР | СРС | | | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 |
| 1 | Измерения и обработка измерений. Теория ошибок. Учет систематических погрешностей: поправочные коэффициенты. Статистический учет случайных погрешностей. Дисперсия и средняя квадратическая погрешность. Доверительный интервал и доверительная вероятность. Критерий Стьюдента. Учет промахов. Метод пс. Метод относительного уклонения. Уровень значимости | 1 | 1 | | 7 | [1-2, 14-15] | Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену | Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум |
| 2 | Регрессионный анализ. Физико-химические дескрипторы и их расчет. Корреляционные соотношения в органической химии. Важнейшие соотношения и постулаты: принцип линейного соотношения свободных энергий, постулат Хэммонда, принцип Поляни-Семенова. Множественные корреляции. | 1 | 1 | | 7 | [1-2, 14-15] | | Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум; контрольная работа |
| 3 | Уравнение Гаммета, его достоинства и недостатки. Уравнение Тафта. Взаимосвязь различных шкал заместителей. Учет стерического эффекта. Множественные корреляции | 1 | 1 | | 7 | [5-6, 12-13] | Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение | Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|--|---|------------|--|---|
| | | | | | | | лабораторной работы, подготовка к экзамену | |
| 4 | <p>Математический аппарат при моделировании кинетических процессов. Кинетический анализ сложных химических реакций. Скорость и механизм химической реакции. Кинетическое уравнение его дифференциальная и интегральная форма, порядок химической реакции. Сложные процессы: обратимые, параллельные и последовательные реакции.</p> <p>Квазиравновесное и квазистационарное приближения в кинетике сложных реакций. Лимитирующая стадия. Кинетический анализ сложных реакций. Прямая и обратная кинетические задачи. Примеры.</p> | 1 | 1 | | 7 | [3-4, 12] | Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену | Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум |
| 5 | <p>Принцип аддитивности. Его применение в различных областях химии. Обоснование применимости метода аддитивности.</p> <p>Метод аддитивности термодинамических вкладов Бенсона. Термодинамическая группа.</p> <p>Типы центральных атомов и лигандов.</p> <p>Примеры простых расчетов. Невалентные взаимодействия, их классификация и учет в методе Бенсона. Расчет изобарной теплоемкости и энтропии органических соединений. Число симметрии. Расчеты энтальпии образования для произвольной температуры</p> | 1 | 1 | | 7 | [6, 12-13] | Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену | Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум |
| 6 | <p>Метод гомологических рядов.</p> <p>Соотношения между энтальпиями образования различных гомологических рядов. Примеры простых соотношений.</p> | 1 | 1 | | 7 | [6, 12-13] | Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и | Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум |

| | | | | | | | | |
|---|--|---|---|--|---|------------|--|---|
| | Вывод уравнений множественной регрессии и конкретные примеры. | | | | | | дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену | |
| 7 | <p>Метод изодесмических реакций. Принцип подобия в термодимических расчетах. Изодесмические реакции. Реакции разделения связей и их формальный подбор. Гомодесмические реакции. Величина теплового эффекта гомодесмической реакции как критерий стабилизации/дестабилизации участников реакции. Методы подбора гомодесмических реакций. Обмен заместителями. Макроинкрементирование. Реакции разделения групп. Примеры</p> | 1 | 2 | | 7 | [16] | Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену | Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум |
| 8 | <p>Математический аппарат квантовой химии.</p> <p>Основы квантовохимической теории. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле.</p> <p>Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока (самосогласованного поля, ССП). Детерминант Слэтера. Понятие о закрытых и открытых оболочках.</p> | 1 | 2 | | 7 | [7-11, 16] | Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену | Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум |

| | | | | | | | | |
|----|--|---|---|--|-----|------------|--|---|
| | | | | | | | | |
| 9 | Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа. Минимальные и валентно-расщепленные базисные наборы. Поляризационные и диффузные функции. Метод ССП МО ЛКАО. | 1 | 1 | | 7 | [7-11, 16] | | Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум |
| 10 | Вычислительные методы квантовой химии. Полуэмпирические методы квантовой химии. Методы, использующие пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрытием: MNDO, AM1, PM3. Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии. Применение полуэмпирических методов к расчету различных свойств органических молекул. | 1 | 1 | | 7 | [7-11, 16] | | Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум |
| 11 | Коррелированное движение электронов. Учет энергии электронной корреляции. Понятие о методах конфигурационного взаимодействия, объединенных кластеров. Основные понятия метода теории возмущений, теория Меллера-Плессе. Сравнительная характеристика методов учета корреляционной энергии. Теория функционала плотности, основные понятия. Метод Кона-Шэма. Различные виды корреляционных и обменных функционалов. Гибридные методы. | 1 | 1 | | 7 | [7-11, 16] | | Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум |
| 12 | Расчет свойств органических молекул. Полное конфигурационное взаимодействие. Совершенный базисный набор. Ограничения, | 1 | 1 | | 4,8 | [7-11, 16] | | Индивидуальный и групповой устный опрос; |

| | | | | | | | | |
|--|--|-----------|-----------|----------|-------------|--|--|-------------------|
| | <p>вызванные усложнением метода расчета. Компромиссные подходы. Метод изодесмических реакций в сочетании со сложным методом квантовохимического расчета. Семейство методов CBS и их отдельные представители: CBS-APNO, CBS-Q3 и др. Семейство композитных методов Gaussian. Метод G1. Его недостатки и их учет в методе G2. Упрощение метода: процедуры G2MP2, G2M(RCC) и другие. Методы G3 и G4</p> | | | | | | | <p>КОЛЛОКВИУМ</p> |
| | <p>Всего часов:</p> | <p>12</p> | <p>14</p> | <p>-</p> | <p>81,8</p> | | | |

