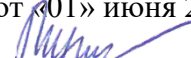



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

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  
Аналитическая химия

Квалификация  
Магистр

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

Для приема: 2018 г.

Уфа 2018г.

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

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры протокол от «01» июня 2018 г. № 11.

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./

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	
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	
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 информирования, описание шкал оценивания	
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	
4.3. <i>Рейтинг-план дисциплины (при необходимости)</i>	
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины	
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	

**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	1. Знать общие подходы к абстрактному мышлению при установлении истины, методы научного исследования путём мысленного расчленения объекта (анализ) и путём изучения предмета в его целостности, единстве его частей (синтез)	ОК-1 способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	
	2. Знать типы нестандартных ситуаций, причины их возникновения и способы выхода из нестандартных ситуаций	ОК-2 готовность действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения	
	3. 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	
	4. Знать теоретические основы традиционных и новых разделов химии и способы их использования при решении конкретных химических и материаловедческих задач	ОПК-1 способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	
	5. Знать основные источники информации для решения задач профессиональной сферы деятельности, основы информационных технологий, основные возможности и правила работы со стандартными программными продуктами при решении профессиональных задач	ОПК-2 владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации	
	6. Знать и анализировать языковой материал текстов на русском языке в нормативном аспекте и вносить необходимые исправления нормативного характера	ОПК-4 готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности	
	7. Знать способы возможных усовершенствований и модификаций	ПК-1 Способность проводить научные исследования по	

	стандартных методик исследования при работе на используемом научном оборудовании	сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	
	10. Знать оборудование и программы, предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ	ПК-3 готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	
	11. Знать основные правила ведения научной дискуссии, 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)	
	12. Знать основные подходы по решению возникающих проблем в своей профессиональной деятельности, пути решения возникающих проблем	ПК-6 способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности	
	13. Знать последовательность педагогической работы при проведении химических экспериментов	ПК-7 владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования	
Умения	1. Уметь абстрактно мыслить, анализировать различные альтернативные варианты решения исследовательских задач, анализировать получаемые экспериментальные результаты и делать соответствующие выводы	ОК-1 способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	
	2. Уметь брать на себя ответственность за проблемы и находить выходы из сложных ситуаций, выдерживать сроки и добивается высокого качества при ликвидации нестандартных ситуаций	ОК-2 готовность действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения	
	3. Уметь планировать цели и устанавливать приоритеты при выборе способов принятия решений с учетом	ОК-3 готовность к саморазвитию, самореализации,	

условий, средств, личностных возможностей и временной перспективы достижения; осуществления деятельности	использованию творческого потенциала	
4. Уметь анализировать и обрабатывать научно-техническую информацию на основе теоретических представлений традиционных и новых разделов химии	ОПК-1 способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	
5. Уметь использовать информационно-коммуникационные и компьютерные технологии для решения профессиональных задач, 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	
6. Уметь понимать риторические аспекты устной и письменной коммуникации на русском языке. Иметь представление о качествах хорошей речи на русском языке	ОПК-4 готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности	
7. Уметь на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа, 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	
уметь проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ	ПК-3 готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	
9. Уметь доказывать использование выбранной траектории исследования, аргументировано доказать свою точку зрения	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)	
10. Уметь планировать стратегию	ПК-6 способность определять	

	решения проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности	и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности	
	11. Уметь грамотно применять навыки проведения химического эксперимента, основных методов получения и исследования химических веществ	ПК-7 владение методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования	
Владения (навыки / опыт деятельности)	1. Владеть навыками абстрактного мышления, анализа, синтеза	ОК-1 способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	
	2. Владеть основами анализа возникающих в ходе работы нестандартных проблем, навыками контроля при возникновении и ликвидации нестандартной ситуации	ОК-2 готовность действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения	
	3. 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	
	4. Владеть навыками организации и проведения учебно-производственного процесса при реализации образовательных программ различного уровня естественно-научной направленности	ОПК-1 способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	
	5. Владеть навыками использования специализированных программ для решения задач профессиональной сферы деятельности	ОПК-2 владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации	
	6. Владеть навыками публичного выступления, аргументации, ведения дискуссии и полемики в сфере научной и профессиональной, а также социокультурной коммуникации на русском языке, Владеть иностранным языком на уровне А2	ОПК-4 готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности	
	7. Владеть начальными навыками в формулировке тематики НИР по	ПК-1 Способность проводить научные исследования по	

	результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований, навыками экспериментальных и теоретических работ по теме НИР магистерской диссертации	сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	
	владеть основами пробоподготовки для проведения различных ФХА и начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	ПК-3 готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	
	9. 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)	
	10. Владеть способностью брать на себя ответственность за результат деятельности	ПК-6 способность определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности	
	11. Владеть основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования	ПК-7 владение 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 основные положения 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 Способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	1. Знать методы абстрактного мышления, методы анализа и синтеза и их взаимосвязь при использовании в нестандартных ситуациях, формы и виды социальной и этической ответственности за принятые решения	Не знает	Знает методы абстрактного мышления, методы анализа и синтеза и их взаимосвязь при использовании в нестандартных ситуациях, формы и виды социальной и этической ответственности за принятые решения
	2. Знать основные закономерности и перспективы развития химических наук и смежных дисциплин	Не знает	Полностью знает основные закономерности и перспективы развития химических наук и смежных дисциплин

Второй этап (уровень)	1. Уметь анализировать получаемые экспериментальные результаты и делать соответствующие выводы в нестандартной ситуации	Не умеет	Способен самостоятельно анализировать получаемые экспериментальные результаты и делать соответствующие выводы в нестандартной ситуации
	2. Уметь использовать методы абстрактного мышления, анализа и синтеза для выбора альтернативных вариантов действий в нестандартных ситуациях решения исследовательских задач и нести меру ответственности за выбранные решения	Не умеет	Сформированное умение анализировать методы абстрактного мышления, анализа и синтеза для выбора альтернативных вариантов действий в нестандартных ситуациях решения исследовательских задач и нести меру ответственности за выбранные решения
Третий этап (уровень)	1. Владеть навыками использования методов абстрактного мышления, анализа и синтеза для выбора альтернативных вариантов действий в нестандартных ситуациях решения исследовательских задач, оценки меры ответственности за выбранные решения	Не владеет	Успешное и систематическое применение навыков методологического использования абстрактного мышления при решении проблем, возникающих при выполнении исследовательских работ, самостоятельного мышления, отстаивания своей точки зрения, оценки меры ответственности за выбранные решения

	2. Владеть навыками выразить сделанные выводы в доступной для понимания форме в нестандартной ситуации	Не владеет	Четко и логически обоснованно формулирует сделанные выводы в нестандартной ситуации
--	--	------------	---

**ОК-2** Готовность действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	1. Знать основные сроки ликвидации нештатных ситуаций	Не знает	Знает основные сроки ликвидации нештатных ситуаций
	2. Знать этические нормы при возникновении нестандартной ситуации	Не знает	Имеет четкие представления об этических нормах при возникновении нестандартной ситуации
Второй этап (уровень)	1. Уметь брать на себя ответственность за проблемы и находить выходы из сложных ситуаций	Не умеет	Берет на себя ответственность в сложившейся нестандартной ситуации

	2. Уметь выдерживать сроки и добивается высокого качества при ликвидации нестандартных ситуаций	Не умеет	Способен самостоятельно устанавливать и контролировать сроки и добивается высокого качества результатов при ликвидации нештатной ситуации
Третий этап (уровень)	1. Владеть навыками контроля при возникновении и ликвидации нестандартной ситуации	Не владеет	Способен самостоятельно контролировать ход ликвидации нестандартной ситуации, а также качество промежуточных результатов.
	2. Владеть навыками ответственности возникновении и ликвидации нестандартной ситуации	Не владеет	Полностью и уверенно брать ответственность при возникновении ряда нестандартных ситуаций

**ОК-3**Способность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
		Не зачтено	Зачтено

Первый этап (уровень)	1. Знать содержание процессов самоорганизации и самообразования, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности	Не знает	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)	1. Уметь планировать цели и устанавливать приоритеты при выборе способов принятия решений с учетом условий, средств, личностных возможностей и временной перспективы достижения; осуществления деятельности	Не умеет	Готов и умеет формировать приоритетные цели деятельности, давая полную аргументацию принимаемым решениям при выборе способов выполнения деятельности
	2. Уметь самостоятельно строить процесс овладения информацией, отобранной и структурированной для выполнения профессиональной деятельности	Не умеет	Умеет строить процесс самообразования с учетом внешних и внутренних условий реализации.
Третий этап (уровень)	1. Владеть приемами саморегуляции эмоциональных	Не владеет	Демонстрирует обоснованный выбор приемов саморегуляции при выполнении деятельности в условиях неопределенности

	и функциональных состояний при выполнении профессиональной деятельности		
	2. Владеть технологиями организации процесса самообразования; приемами целеполагания во временной перспективе, способами планирования, организации, самоконтроля и самооценки деятельности	Не владеет	Демонстрирует возможность переноса технологии организации процесса самообразования, сформированной в одной сфере деятельности, на другие сферы, полностью обосновывая выбор используемых методов и приемов

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

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
		Не зачтено	Зачтено

Первый этап (уровень)	1. Знать теоретические основы традиционных и новых разделов химии и способы их использования при решении конкретных химических и материаловедческих задач	Не знает	Знает закономерности протекания химических процессов с участием веществ различной природы, но допускает отдельные неточности при их формулировке и оценке условий применимости этих закономерностей при решении конкретных химических и материаловедческих задач
Второй этап (уровень)	1. Уметь анализировать и обрабатывать научно-техническую информацию на основе теоретических представлений традиционных и новых разделов химии	Не умеет	Умеет обосновывать выбор средств решения конкретных задач профессиональной деятельности на основе теоретических представлений традиционных и новых разделов химии
	2. Уметь разрабатывать учебно-методические материалы для реализации образовательных программ различного уровня и направленности, связанных с химией и смежными дисциплинами	Не умеет	Умеет готовить учебно-методические материалы для отдельных разделов образовательных программ СПО, ДПО
Третий этап (уровень)	1. Владеть навыками обработки и анализа научно-технической информации и	Не владеет	Владеет навыками анализа научно-технической информации по общим разделам химии, но допускает неточности при интерпретации отдельных результатов работ в профессиональной сфере деятельности



	результатов отдельных этапов работ с учетом теоретических основ традиционных и новых разделов химии		
	2. Владеть навыками организации и проведения учебно-производственного процесса при реализации образовательных программ различного уровня естественно-научной направленности	Не владеет	Владеет навыками составления отдельных разделов образовательных программ СПО, ДПО, но не имеет опыта их практической реализации

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

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	1. Знать основные приемы и методы разработки специализированных программ для решения задач в области химии и материаловедения	Не знает	Знает стандартные приемы, используемые при разработке специализированных программ поиска, систематизации и обработки экспериментальных данных

	2. Знать основные требования к представлению результатов работ в профессиональной сфере деятельности	Не знает	Знает требования к формату представления информации в виде научной публикации (статья или тезисы доклада на конференции)
Второй этап (уровень)	1. Уметь модернизировать стандартные и разрабатывать специализированные программы для решения задач профессиональной сферы деятельности	Не умеет	Умеет разрабатывать специализированные программы для решения профессиональных задач и создавать программные продукты с удобным пользовательским интерфейсом
	2. Уметь использовать информационно-коммуникационные и компьютерные технологии для представления результатов профессиональной деятельности	Не умеет	Умеет самостоятельно использовать информационно-коммуникационные и компьютерные технологии для представления результатов профессиональной деятельности
Третий этап (уровень)	1. Владеть навыками разработки специализированных программ для решения задач профессиональной сферы деятельности	Не владеет	Владеет основными навыками и имеет опыт разработки специализированных программ для решения конкретных задач профессиональной сферы деятельности
	2. Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений	Не владеет	Имеет опыт представления результатов деятельности профессиональному сообществу (является соавтором статей, тезисов докладов и пр.)

**ОПК-4** Готовность к коммуникации в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном языке для решения задач профессиональной деятельности

Этап (уровень) освоения компетенци и	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	1. Знать риторические правила и приемы подготовки и произнесения речей в сфере научной и профессиональной, а также социокультурной коммуникации на русском языке	Не знает	Демонстрирует свободное и уверенное знание риторических правил и приемов подготовки и произнесения речей в сфере научной и профессиональной, а также социокультурной коммуникации на русском языке, не допускает ошибок
	2. Знать теорию речевого воздействия и его основные методы, и приемы для успешного осуществления коммуникации на русском языке в научной, профессиональной и социокультурной сферах	Не знает	Демонстрирует свободное и уверенное знание теории речевого воздействия и его основных методов и приемов для успешного осуществления коммуникации на русском языке в научной, профессиональной и социокультурной сферах. Не допускает ошибок.
Второй этап (уровень)	1. Уметь использовать базовые современные методы и технологии научной коммуникации, в том числе информационные, на государственном и иностранном языке	Не умеет	Демонстрирует устойчивое умение использовать базовые современные методы и технологии научной коммуникации, в том числе информационные, на государственном и иностранном языке, не допускает ошибок.

	2. Уметь использовать систему современных методов и технологий научной коммуникации, в том числе информационных, на государственном и иностранном языке	Не умеет	Демонстрирует устойчивое умение использовать систему современных методов и технологий научной коммуникации, в том числе информационных, на государственном и иностранном языке, не допускает ошибок.
Третий этап (уровень)	1. Владеть навыками создания на русском языке точной, логичной, ясной, выразительной, уместной речи и продуцирования текстов различных жанров научного и официально-делового стилей	Не владеет	Демонстрирует свободное и уверенное владение навыками создания точной, логичной, ясной, выразительной, уместной речи и продуцирования текстов различных жанров научного и официально-делового стилей на русском языке, не допускает ошибок.
	2. Владеть навыками публичного выступления, аргументации, ведения дискуссии и полемики в сфере научной и профессиональной, а также социокультурной коммуникации на русском языке	Не владеет	Демонстрирует свободное и уверенное владение навыками публичного выступления, аргументации, ведения дискуссии и полемики в сфере научной и профессиональной, а также социокультурной коммуникации на русском языке, не допускает ошибок.

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

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Не зачтено	Зачтено
-------------------------------------	---	------------	---------

Первый этап (уровень)	Владеть: навыками самостоятельного подбора условий при работе на научном оборудовании используемого в НИР	Не знает	Владеет навыками самостоятельного подбора условий при работе на научном оборудовании используемого в НИР
Второй этап (уровень)	Уметь: теоретически обосновать и критически оценивать полученные результаты, выявлять недостатки используемых методик и формулировать способы их устранения.	Не умеет	Умеет теоретически обосновать и критически оценивать полученные результаты, выявлять недостатки используемых методик и формулировать способы их устранения.
Третий этап (уровень)	Знать: актуальные направления исследований по теме НИР	Не владеет	Знает актуальные направления исследований по теме НИР

**ПК-3** готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	знать оборудование и программы, предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ	Затрудняется в определении назначения компонентов прибора программ.	Самостоятельно подключает компоненты приборов. Имеет представления о 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 и начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	Затрудняется в подготовке проб и объектов для последующего исследования и затрудняется в порядке включения и выключения прибора, снятии	Самостоятельно способен осуществить полный цикл пробоподготовки. Способен к проведению полного цикла работ на специализированном научном оборудовании при проведении экспериментов невысокой сложности

		показаний измерений	
--	--	------------------------	--

**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)

Этап (уровень) освоения компетенци и	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	1. Знать научную новизну, актуальность, практическую значимость исследования; знать организации или предприятия, которым интересны полученные результаты или по заказу которых проводятся исследования	Не знает	Представляет актуальность и научную новизну; знает организации заинтересованные в полученных результатах
	2. Знать основные зарубежные журналы, в которых публикуются статьи, связанные с тематикой исследований. Правила представления результатов исследования при публикации в иностранных журналах	Не знает	Выбирает научные журналы подходящие по тематике для публикации материалов исследования. Знает правила представления результатов исследования

Второй этап (уровень)	1. Уметь доказывать использование выбранной траектории исследования, аргументировано доказать свою точку зрения	Не умеет	Аргументировано обосновывает основные этапы исследования, выбор методов и достоверность результатов.
	2. Уметь грамотно и четко отвечать на вопросы при выступлении с устными сообщениями на конференциях различного уровня	Не умеет	Свободно отвечает на вопросы при общении с аудиторией различного уровня.
Третий этап (уровень)	1. Владеть навыками участия в научной дискуссии, применяя разносторонние знания о специфике предприятия (исследовательского института, фирмы и т.д.), в котором студент проводит научные исследования	Не владеет	Свободно применяет специфические химические термины и знания в научной дискуссии
	2. Владеть навыками делового письма при общении (например, посредством электронной почты) с редакциями химических журналов (в т.ч. и с иностранными)	Не владеет	Ведет переписку с редакцией научного журнала. Способен отвечать на замечания рецензента

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

Этап (уровень)	Планируемые результаты	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено

освоения компетенции	обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)		
Первый этап (уровень)	1. Знать основные подходы по решению возникающих проблем	Не знает	Знает основные подходы по решению возникающих проблем
	2. Знать основные риски принимаемых решений и последствия своих действий	Не знает	Знает основные риски принимаемых решений и последствия своих действий
Второй этап (уровень)	1. Уметь разбираться в проблемах, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности	Не умеет	Умеет разбираться в проблемах, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности
	2. Уметь планировать стратегию решения проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности	Не умеет	Умеет планировать стратегию решения проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности
Третий этап (уровень)	1. Владеть способностью к выбору стратегии решения проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности	Не владеет	Владеет способностью к выбору стратегии решения проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности
	2. Владеть способностью брать на себя ответственность	Не владеет	Владеет способностью брать на себя ответственность за результат деятельности



	за результат деятельности		
--	---------------------------	--	--

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

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	зачтено
Первый этап (уровень)	1. Знать методы отбора материала для теоретических занятий и лабораторных работ	Не знает	Знает методы отбора материала для теоретических занятий и лабораторных работ
	2. Знать последовательность педагогической работы при проведении химических экспериментов	Не знает	Имеет четкие представления о выборе последовательности педагогической работы при проведении химических экспериментов.
Второй этап (уровень)	1. Уметь аргументировано и ясно строить устную речь во время чтения лекции и самостоятельно формулировать цели и задачи предмета	Не умеет	Аргументировано и ясно строить устную речь во время чтения лекции и самостоятельно формулировать цели и задачи предмета.
	2. Уметь грамотно применять навыки проведения химического эксперимента, основных методов получения и исследования химических веществ	Не умеет	Умеет грамотно применять навыки проведения химического эксперимента, основных методов получения и исследования химических веществ.

Третий этап (уровень)	1. Владеть основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования	Не владеет	Владеет основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования.
	2. Владеть способностью критически оценивать накопленный педагогический опыт и творчески анализировать свои возможности	Не владеет	Способен критически оценивать накопленный педагогический опыт и творчески анализировать свои возможности.

**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	1. Знать общие подходы к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	ОК-1 способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
	2. Знать типы нестандартных ситуаций, причины их возникновения и способы выхода из нестандартных ситуаций	ОК-2 готовность действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
	3. 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

4. Знать теоретические основы традиционных и новых разделов химии и способы их использования при решении конкретных химических и материаловедческих задач	ОПК-1 способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
5. Знать основные требования к представлению результатов работ в профессиональной сфере деятельности	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
6. Знать и анализировать языковой материал текстов на русском языке в нормативном аспекте и вносить необходимые исправления нормативного характера	ОПК-4 готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
знать научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации	ПК-1 способностью 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

	8. Знать научную новизну, актуальность, практическую значимость исследования; знать организации или предприятия, которым интересны полученные результаты или по заказу которых проводятся исследования	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
	9. Знать основные подходы по решению 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
	10. Знать последовательность педагогической работы при проведении химических экспериментов	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	1. Уметь абстрактно мыслить, анализировать различные ситуации	ОК-1 способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
	2. Уметь брать на себя ответственность за проблемы и находить выходы из сложных ситуаций, выдерживать сроки и добивается высокого качества при ликвидации нестандартных ситуаций	ОК-2 готовность действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
	3. Уметь планировать цели и устанавливать приоритеты при выборе способов принятия решений с учетом условий, средств, личностных возможностей и временной перспективы достижения; осуществления деятельности	ОК-3 готовность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет

	4. Уметь анализировать и обрабатывать научно-техническую информацию на основе теоретических представлений традиционных и новых разделов химии	ОПК-1 способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
	5. Уметь использовать информационно-коммуникационные и компьютерные технологии для представления результатов профессиональной деятельности	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
	6. Уметь понимать риторические аспекты устной и письменной коммуникации на русском языке. Иметь представление о качествах хорошей речи на русском языке	ОПК-4 готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности	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; 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	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
	уметь проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ	ПК-3 готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет

	8. Уметь доказывать использование выбранной траектории исследования, аргументировано доказать свою точку зрения	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
	9. Уметь планировать стратегию решения 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
	10. Уметь грамотно применять навыки проведения химического эксперимента, основных методов получения и исследования химических веществ	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 навыками	1. Владеть навыками абстрактного мышления, анализа, синтеза	ОК-1 способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, реферат, зачет
	2. Владеть основами анализа возникающих в ходе работы нестандартных проблем, навыками контроля при возникновении и ликвидации нестандартной ситуации	ОК-2 готовность действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
	3. 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
	4. Владеть навыками организации и проведения учебно-производственного процесса при реализации	ОПК-1 способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос,

образовательных программ различного уровня естественно-научной направленности	разделов химии при решении профессиональных задач	зачет
5. Владеть навыками использования специализированных программ для решения задач профессиональной сферы деятельности	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
6. Владеть навыками публичного выступления, аргументации, ведения дискуссии и полемики в сфере научной и профессиональной, а также социокультурной коммуникации на русском языке, Владеть иностранным языком на уровне С 1	ОПК-4 готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности	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; 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	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
уметь проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ	ПК-3 готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет

	8. Владеть навыками участия в научной дискуссии, применяя разносторонние знания о специфике предприятия (исследовательского института, фирмы и т.д.), в котором студент проводит научные исследования	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
	9. Владеть способностью брать на себя ответственность за результат 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
	10. Владеть основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования	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

### **Вопросы для практических занятий**

#### **Типовые критерии выведения итоговой оценки за компоненты компетенций при проведении промежуточной аттестации в виде зачета**

- интегральная оценка за знание по 2-х балльной шкале выставляется студенту по результатам текущего и рубежного контроля в форме теоретических опросов, коллоквиумов, докладов, тестов и других контрольных мероприятий, запланированных в рабочей программе дисциплины;

- интегральная оценка за умение по 2-х балльной шкале выставляется студенту по результатам текущего и рубежного контроля в форме выполнения практических заданий, запланированных в рабочей программе дисциплины;

- интегральная оценка за владение по 2-х балльной шкале выставляется студенту по результатам текущего и рубежного контроля в форме выполнения индивидуальных заданий, защиты лабораторных работ и других контрольных мероприятий, запланированных в рабочей программе дисциплины

#### ***Виды самостоятельной работы:***

- изучение основной и дополнительной литературы в целях самоподготовки;
- конспектирование материалов научной и учебной литературы по указанию преподавателя;
- решение тестов по заданию преподавателя;
- подготовка к занятиям, проводимым в интерактивной форме;



- написание реферата по заданию преподавателя.

**Формы текущего контроля:**

- устный опрос на практическом занятии;  
- коллоквиум на практическом занятии.

**Форма рубежного контроля – письменная контрольная работа.**

**Формы промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины – зачет.**

Текущий контроль знаний, умений и навыков для оценивания компонентов дисциплинарных частей компетенций осуществляется на протяжении всех лекционных и лабораторных занятий в 3 семестре. Он проводится после изучения новой темы с целью выяснения наиболее сложных вопросов, степени усвоения информации, поддержания внимания слушающей аудитории, а также каждым студентом индивидуально.

Рубежный контроль осуществляется в конце 1-го и 2-го модулей, выделяемых в рамках освоения дисциплины. Он позволяет проверить отдельные компетенции или совокупности взаимосвязанных компетенций.

Промежуточный контроль осуществляется в конце семестра и завершает изучение дисциплины. Подобный контроль помогает оценить более крупные совокупности знаний и умений, а также формирование определенных общекультурных и профессиональных компетенций. Совокупность приобретенных студентом общекультурных и профессиональных компетенций оценивается во время итогового контроля.

Результаты активности студентов оцениваются по 2х-балльной шкале (зачтено / не зачтено) и заносятся в книжку преподавателя. Они учитываются в виде интегральной оценки при проведении промежуточной аттестации.

**Индивидуальный опрос** проводится после изучения новой темы с целью выяснения наиболее сложных вопросов, степени усвоения информации.

**Групповой опрос** проводится после изучения новой темы с целью выяснения наиболее сложных вопросов, степени усвоения информации, поддержания внимания слушающей аудитории.

**Коллоквиум** проводится в конце семестра после изучения всех тем. Он осуществляется в виде беседы преподавателя с каждым из студентов по всем вопросам дисциплины.

**Письменная контрольная работа** проводится после изучения раздела 2.

**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  $\pi\sigma$ . 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.



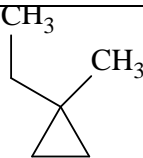
**Критерии оценки индивидуального и группового опроса:**

- «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 представления об обсуждаемом вопросе.

**Контрольная работа № 1.**

**Вариант №1**

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	$W$	$Z$	$iR$
			
			
			


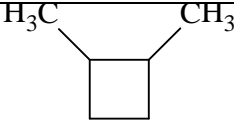
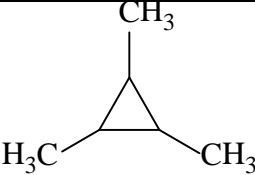
2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1H$  ЯМР приведённых соединений  
(а) уксусная кислота;

- (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  $\text{CH}_3$  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 №2

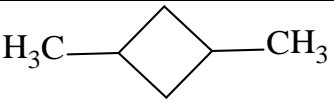
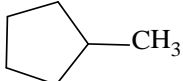
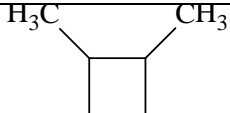
1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь большую 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  $^1\text{H}$  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  $\text{OH}$  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	$W$	$Z$	$iR$
			
			
			

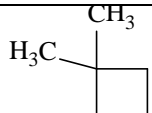
2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1H$  ЯМР приведённых соединений

- (а) метилформиат;  
 (б) этилформиат;  
 (в)  $n$ -пропилформиат

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена.  
 4. 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.  
 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 №4

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  $^1\text{H}$  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  $\text{OH}$  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 №5

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  $^1\text{H}$  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 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




- (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  $C_6H_3(OH)_3$ , 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 №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

(а) тетраэдран  $C_4H_4$ ;

(б) кубан  $C_8H_8$ ;

(в) призма  $C_6H_6$ .

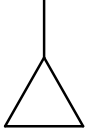

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом хрома в молекуле дибензолхрома.

4. Укажите положение групп  $OH$  в молекуле диоксибензола  $C_6H_2(OH)_2$ , которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.

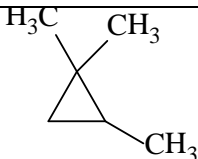
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

### Вариант №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  $iR$  оформить в виде таблицы:

Соединение	$W$	$Z$	$iR$
$CH_3$ 			
$H_3C$ $CH_3$ 			



			
---	--	--	--

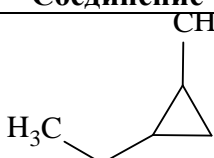
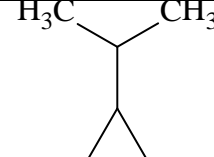
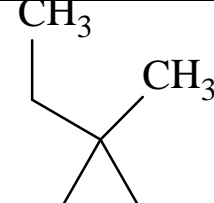
2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1\text{H}$  ЯМР приведённых соединений

- (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  $\text{OH}$  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 №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  $iR$  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  $^1\text{H}$  ЯМР приведённых соединений

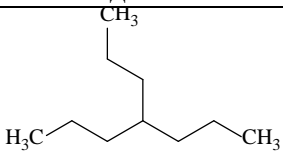
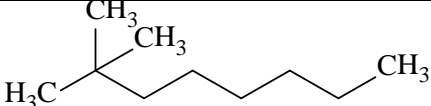
- (а) бензвален;

- (б) бензол;  
 (в) фульвен.

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена?
4. Укажите положение групп  $\text{CH}_3$  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  $^1\text{H}$  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  $\text{CH}_3$  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.



## 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](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](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

Университет обеспечен необходимым комплектом лицензионного программного обеспечения дисциплин (модулей).

Электронно-библиотечная система (электронная библиотека) и электронная информационно-образовательная среда университета обеспечивают одновременный доступ более 25% обучающихся по данному направлению подготовки.

Студенты имеют возможность доступа к фондам учебно-методической документации, библиографическим и реферативным базам данных, электронным библиотечным системам («Электронный читальный зал», «Университетская библиотека онлайн», «Лань» по дисциплинам естественнонаучного направления), к электронному каталогу библиотеки и Интернет-ресурсам (базы данных российских библиотек, полнотекстовые базы данных: каталог авторефератов и диссертаций РГБ, научная электронная библиотека «eLibrary», онлайн база данных «Polpred», патентная база данных «Questel», мультидисциплинарный журнал «Science» и мультидисциплинарный ресурс «AnnualReviews» и др.). Вся необходимая учебно-методическая документация для студентов размещена на сайте вуза, доступ – по IP адресам локальной сети вуза.

Для контроля знаний, умений и навыков студентов в соответствии с выше обозначенными компетенциями на всех стадиях изучения дисциплины разработан дистанционный курс «Основы вычислительной химии», который расположен по адресу: <http://sdo.bashedu.ru/course/view.php?id=1936>.



## 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><b>учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа:</b> аудитория № 405 (корпус химического факультета), аудитория №311 (корпус химического факультета), аудитория № 310 (корпус химического факультета), аудитория № 305 (корпус химического факультета).</p>	<p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 405</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 311</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 310</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 305</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p>	<p>1. Права на программы для ЭВМ операционная система для персонального компьютера Win SL 8 Russian OLP NL AcademicEdition Legalization GetGenuine.</p> <p>2. Права на программы для ЭВМ обновление операционной системы для персонального компьютера Windows Professional 8 Russian Upgrade OLP NL Academic Edition. Договор №104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные.</p> <p>3. Программа для ЭВМ Office Standard 2013 Russian OLP NL AcademicEdition. Договор №114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные.</p> <p>4. Права на использование программного обеспечения Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный, продление подписки на 1 год. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г.</p>
<p><b>учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа:</b> аудитория № 405 (корпус химического факультета), аудитория №311 (корпус химического факультета), аудитория № 310 (корпус химического факультета), аудитория № 305 (корпус химического факультета), аудитория № 001 (корпус</p>	<p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 405</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 311</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 310</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 305</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p>	<p>1. Права на программы для ЭВМ операционная система для персонального компьютера Win SL 8 Russian OLP NL AcademicEdition Legalization GetGenuine.</p> <p>2. Права на программы для ЭВМ обновление операционной системы для персонального компьютера Windows Professional 8 Russian Upgrade OLP NL Academic Edition. Договор №104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные.</p> <p>3. Программа для ЭВМ Office</p>

<p>химического факультета), аудитория № 002 (корпус химического факультета), аудитория № 006 (корпус химического факультета), аудитория № 007 (корпус химического факультета), аудитория № 008 (корпус химического факультета).</p>	<p><b>Аудитория № 001</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 002</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 006</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 007</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 008</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p>	<p>Standard 2013 Russian OLP NL AcademicEdition. Договор №114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные.</p> <p>4. Права на использование программного обеспечения Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный, продление подписки на 1 год. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г.</p>
<p><b>учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций, учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации:</b> аудитория № 405 (корпус химического факультета), аудитория №311 (корпус химического факультета), аудитория № 310 (корпус химического факультета), аудитория № 305 (корпус химического факультета), аудитория № 001 (корпус химического факультета), аудитория № 002 (корпус химического факультета), аудитория № 006 (корпус химического факультета), аудитория № 007 (корпус химического факультета), аудитория № 008 (корпус химического факультета)</p>	<p><b>Аудитория № 405</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p><b>Аудитория № 311</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p><b>Аудитория № 310</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p><b>Аудитория № 305</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p><b>Аудитория № 001</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 002</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 006</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 007</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 008</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p>	<p>1. Права на программы для ЭВМ операционная система для персонального компьютера Win SL 8 Russian OLP NL AcademicEdition Legalization GetGenuine.</p> <p>2. Права на программы для ЭВМ обновление операционной системы для персонального компьютера Windows Professional 8 Russian Upgrade OLP NL Academic Edition. Договор №104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные.</p> <p>3. Программа для ЭВМ Office Standard 2013 Russian OLP NL AcademicEdition. Договор №114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные.</p> <p>4. Права на использование программного обеспечения Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный, продление подписки на 1 год. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г.</p>
<p><b>помещение для самостоятельной работы:</b> зал доступа к электронной информации Библиотеки,</p>	<p><b>Зал доступа к электронной информации Библиотеки</b> ПК (моноблок) – 8 шт., подключенных к сети Интернет, неограниченный доступ к электронным БД и ЭБС; количество посадочных мест – 8. <b>Читальный зал №1</b></p>	<p>1. Права на программы для ЭВМ операционная система для персонального компьютера Win SL 8 Russian OLP NL AcademicEdition</p>



<p>читальный зал №1 (главный корпус), читальный зал №2 (корпус физмата), читальный зал №4 (корпус биофака), читальный зал №5 (гуманитарный корпус), читальный зал №6 (корпус института права), читальный зал №7 (гуманитарный корпус), аудитория № 418 (корпус химического факультета)</p>	<p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, Wi-Fi доступ для мобильных устройств, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.  <b>Читальный зал №2</b>  Научный и учебный фонд, научная периодика, Wi-Fi доступ для мобильных устройств, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.  <b>Читальный зал №4</b>  Научный и учебный фонд, научная периодика, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 60.  <b>Читальный зал №5</b>  Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.  <b>Читальный зал №6</b>  Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.  <b>Читальный зал №7</b>  Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.  <b>Аудитория № 418</b>  Учебная мебель, факсимильным аппарат Panasonic KX-FL423RUB – 2 шт., эН-метр рН-150МИ (с гос. поверкой), автотрансформатор TDGC2-0.5K(0,5кВТ; 2А,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 Tolorino – 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&lt;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"Веpl.клавиат ура+мышь, принтер Canon i-SENSYS MF3010, рН-метр рН-150МИ с гос.поверкой, системный блок ПК (775), шкаф сушильный LOIP LF-25/350-GS1, (310X 310x310 мм б/вентилятора.нерж.сталь цифровой контролер), количество посадочных мест – 10.</p>	<p>Legalization GetGenuine.  2. Права на программы для ЭВМ обновление операционной системы для персонального компьютера Windows Professional 8 Russian Upgrade OLP NL Academic Edition. Договор №104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные.  3. Программа для ЭВМ Office Standard 2013 Russian OLP NL AcademicEdition. Договор №114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные.  4. Права на использование программного обеспечения Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный, продление подписки на 1 год. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г.</p>
<p><b>помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования:</b> аудитория № 416 (корпус химического факультета)</p>	<p><b>Аудитория № 416</b>  Атомно-абсорбционный спектрофотометр модель AA-7000, фирмы "Шимадзу", Япония, баллон с гелием марки А – 2 шт, вентилятор ВЕНТС 100 ВКМц/*1/, газовый хромато-масс-спектрометр модель GCMS-QP 2010PIUS, компьютер в составе: системный блок, монитор, клавиатура, мышь, кондиционер QUATTROCUMA QV/QN-F12WA, ноутбук Fujitsu Lifeboок F530 Intel Core i3-330M/4Gb/500Gb/ DVD-RW/ВТ/15.6"/Wi n7НВ+office, персональный компьютер в комплекте HP AiO 20"CQ 100 eu (моноблок), электроплитка Irit IR-8200,1500Вт диаметр конфорки 185мм.</p>	<p>1. Права на программы для ЭВМ операционная система для персонального компьютера Win SL 8 Russian OLP NL AcademicEdition Legalization GetGenuine.  2. Права на программы для ЭВМ обновление операционной системы для персонального компьютера Windows Professional 8 Russian Upgrade OLP NL Academic Edition. Договор №104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные.</p>

		<p>3. Программа для ЭВМ Office Standard 2013 Russian OLP NL AcademicEdition. Договор №114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные.</p> <p>4. Права на использование программного обеспечения Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный, продление подписки на 1 год. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г.</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 пσ. Метод относительного уклонения. Уровень значимости	1	1		6	[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	1	1		6	[1-2, 14-15]		Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум; контрольная работа

	энергий, постулат Хэммонда, принцип Поляни-Семенова. Множественные корреляции.							
3	Уравнение Гаммета, его достоинства и недостатки. Уравнение Тафта. Взаимосвязь различных шкал заместителей. Учет стерического эффекта. Множественные корреляции	1	1		6	[5-6, 12-13]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
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	1	1		8	[3-4, 12]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум

	сложных реакций. Лимитирующая стадия. Кинетический анализ сложных реакций. Прямая и обратная кинетические задачи. Примеры.							
5	Принцип аддитивности. Его применение в различных областях химии. Обоснование применимости метода аддитивности. Метод аддитивности термохимических вкладов Бенсона. Термохимическая 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	1	1		6	[6, 12-13]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
6	Метод гомологических рядов. Соотношения между энтальпиями образования различных гомологических рядов. Примеры простых соотношений. Вывод	1	1		6	[6, 12-13]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы,	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум

	уравнений множественной регрессии и конкретные примеры.						выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	
7	Метод изодесмических реакций. Принцип подобия в термохимических 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	1	2		6	[16]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
8	<b>Математический аппарат квантовой химии.</b> Основы квантовохимической теории. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронное	1	2		13		Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум

	<p>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.</p>					[7-11, 16]	экзамену	
9	<p>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.</p>	1	1			[7-11, 16]		Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
10	Вычислительные методы	1				6		Индивидуальный



	<p>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.</p>		1			[7-11, 16]		и групповой устный опрос; коллоквиум
11	<p>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</p>	1	1		6	[7-11, 16]		Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум

	корреляционных и обменных функционалов. Гибридные методы.							
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	1	1	-	6,8	[7-11, 16]		Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
	<b>Всего часов:</b>	12	14	-	67,8			

