

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич
Должность: Ректор

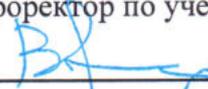


МИНОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)

Дата подписания программы дисциплины: 03.04.2025 16:20:27
Уникальный программный ключ: 04c19ed8bfb98f3b6cb77a486b9a8788b8322323

Рабочая программа дисциплины "Квантовая химия" по направлению подготовки (специальности) 04.05.01
"Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия
ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

стр. 1

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе
 / В.Е. Федоров
« 28 » 06 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (модуля)*
Квантовая химия

Направление подготовки (специальность)

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)

Органическая и биоорганическая химия

Присваиваемая квалификация (степень)

Химик. Преподаватель химии.

Форма обучения

очная

Год(ы) набора 2021

*Рабочая программа дисциплины (модуля) адаптирована для инклюзивного обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Челябинск 2021 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля) принята:

Ученым советом химического факультета

Протокол заседания №4 « 25 » 06 20 21 г.

Председатель Ученого совета
химического факультета



В.А. Бурмистров

Секретарь Ученого совета
химического факультета



С.Е. Працкова

Рабочая программа дисциплины (модуля) одобрена и рекомендована кафедрой

Химической технологии и вычислительной химии

Протокол заседания № 13 от 21.06.2021

И.о. заведующего кафедрой



Кропачева О.И.

Автор (составитель)



д.х.н., профессор, Белик А.В.

**Структура рабочей программы соответствует приказу ректора
ФГБОУ ВО «ЧелГУ» от «05» декабря 2018 г. № 678-1**

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре ОПОП
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля)
4. Объем дисциплины (модуля)
5. Структура и содержание дисциплины (модуля)
6. Фонд оценочных средств
 - 6.1. Перечень видов оценочных средств
 - 6.2. Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации
 - 6.3. Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации
 - 6.4. Критерии оценивания
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)
 - 7.1. Рекомендуемая литература
 - 7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"
 - 7.3. Перечень информационных технологий
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Специальные условия освоения дисциплины обучающимися с инвалидностью и ограниченными возможностями здоровья

Рабочая программа дисциплины "Квантовая химия" по направлению подготовки (специальности) "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 4
1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ	
Целью преподавания дисциплины является рассмотрение основных положений квантовой химии, истории развития дисциплины, фундаментальных понятий, принципов и положений, выработанных знаменитыми учеными, для обоснованного взгляда на строение материи и механизмы химических реакций.	
Задачи курса:	
1. Познакомить студентов с историей становления и развития квантовой химии.	
2. Дать представления о фундаментальных основах дисциплины.	
3. Познакомить с основами квантовой механики.	
4. Дать представление о современных проблемах дисциплины.	
Результаты обучения по дисциплине направлены на достижение индикаторов:	
УК-1.2 Использует критический анализ, систематизацию и обобщение информации для решения проблемной ситуации;	

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП	
Цикл (раздел) ОПОП:	Б1.В.1.10
2.1 Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
Для освоения данной дисциплины студенты должны обладать знаниями, предполагаемые образовательной программой подготовки специалиста по таким базовым дисциплинам, как «Математика», «Физика», "История и методология химии".	
Физика	
Математика	
История и методология химии	
2.2 Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
Знания, приобретенные в ходе изучения дисциплины "Квантовая химия", могут быть использованы при изучении дисциплин "Строение вещества".	
Строение вещества	

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)	
УК-1: Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий	
Знать:	
Для достижения УК-1.2 знать: алгоритмы поиска специализированной информации, критерии системного анализа;	
Уметь:	
Для достижения УК-1.2 уметь: использовать критический анализ, систематизацию и обобщение информации для решения поставленных задач в области химии;	
Владеть:	
Для достижения УК-1.2 владеть: навыками сбора, анализа и систематизации специализированной информации; оценивания практических последствий реализации проблемной ситуации при решении поставленных задач.	

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

3.1 Знать:	
3.1.1	основные этапы развития квантовой химии; фундаментальные основы квантовой химии; особенности современного состояния квантовой химии; этапы эволюции фундаментальных понятий и возникающих проблемных ситуаций.
3.2 Уметь:	
3.2.1	собирать и анализировать полученную информацию, выделять главное и второстепенное; самостоятельно строить процесс овладения новой информацией; осуществлять обобщения.
3.3 Владеть:	
3.3.1	системой фундаментальных понятий квантовой химии, формами и методами научного познания; методикой и методологией получения новых знаний; методами выбора стратегии действий.

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоемкость	4 ЗЕТ
Часов по учебному плану : 144 в том числе : аудиторные занятия : 108 самостоятельная работа : 3 часов на контроль : 18	Виды контроля в семестрах: экзамены 8

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Литература
Раздел 1. Введение в квантовую химию.				
1.1	Введение в квантовую химию. Цели, задачи, определения. Математический аппарат и физические принципы. /Лек/	8	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
1.2	Цели, задачи, определения. Математический аппарат и физические принципы. /Пр/	8	2	Л1.1 Л1.2Л1.3Л2.1 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 2. Исторически первые методы рассмотрения молекулярных систем.				
2.1	Исторически первые методы рассмотрения молекулярных систем. История вопроса. Метод ВС и МО. Метод Хюккеля. Практические приложения метода. Интерпретация результатов и их значение. Метод ППП. /Лек/	8	6	Л1.1 Л1.2Л1.3Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
2.2	История вопроса. Методы ВС и МО. Метод Хюккеля. Практические приложения метода. Интерпретация результатов и их значение. Метод ППП. /Пр/	8	6	Л1.1Л1.2Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
2.3	Исторически первые методы рассмотрения молекулярных систем. Практические расчеты. /Лаб/	8	6	Л1.1Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.4 Э1 Э2 Э3
2.4	Исторически первые методы рассмотрения молекулярных систем /Ср/	8	1	Л1.1 Л1.2Л1.3Л2.1 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 3. Всевалентные полуэмпирические методы квантовой химии				
3.1	Всевалентные полуэмпирические методы квантовой химии. CNDO, INDO, MINDO, MNDO, AM1, PM3, ZINDO и др. Их особенности, варианты параметризаций, возможности применений и программные продукты. /Лек/	8	10	Л1.1Л1.2Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
3.2	Полуэмпирические методы CNDO, INDO, MINDO, MNDO, AM1, PM3, ZINDO и др. Их особенности, варианты параметризаций, возможности применений и программные продукты. /Лаб/	8	12	Л1.1Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
3.3	Всевалентные полуэмпирические методы квантовой химии. /Пр/	8	10	Л1.1Л1.2Л2.1 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
3.4	Всевалентные полуэмпирические методы квантовой химии /Ср/	8	1	Л1.1Л1.2Л2.1 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 4. «ab initio» методы.				
4.1	«ab initio» методы. Особенности, специфика и практические результаты. Программные продукты. /Лек/	8	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
4.2	«ab initio» методы. Особенности, специфика и практические результаты. Программные продукты. /Лаб/	8	12	Л1.1 Л1.2Л1.3Л2.1 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
4.3	«ab initio» методы. Особенности, специфика и практические результаты. Программные продукты. /Пр/	8	6	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4

Рабочая программа дисциплины "Квантовая химия" по направлению подготовки (специальности) "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»				стр. 6
4.4	«abinitio» методы /Ср/	8	1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 5. Методы теории функционала плотности (DFT).				
5.1	Методы теории функционала плотности(DFT). История вопроса. Проблемы учета корреляции. Виды функционалов. Получаемые результаты. Программные продукты и их практическое использование. /Лек/	8	6	Л1.1 Л1.2Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4
5.2	Методы теории функционала плотности(DFT). /Пр/	8	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
5.3	Методы теории функционала плотности(DFT). /Лаб/	8	2	Л1.1Л1.2Л2.1 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
5.4	DFT /КонтАт/	8	15	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 6. Теория реакционной способности органических соединений.				
6.1	Теория реакционной способности органических соединений. Классические представления. Роль методов квантовой химии. Индексы реакционной способности. Построение ППЭ. /Лек/	8	6	Л1.1Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
6.2	Теории реакционной способности органических соединений. /Пр/	8	4	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4
6.3	Методы расчета реакционной способности органических соединений. /Лаб/	8	2	Л1.1Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 7. Молекулярная динамика и химическая кинетика.				
7.1	Молекулярная динамика и химическая кинетика. История вопроса. Методы исследования. Бимолекулярные газовые химические реакции. Расчет констант скоростей реакций. Получаемые результаты. Пути развития. /Лек/	8	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
7.2	Молекулярная динамика и химическая кинетика. /Пр/	8	4	Л1.1 Л1.2Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
7.3	Молекулярная динамика и химическая кинетика. /Лаб/	8	2	Л1.1Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

6.1. Перечень видов оценочных средств

Темы рефератов
Вопросы для тестов
Вопросы к экзамену

6.2. Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации

Примерные темы рефератов:

1. Цели, задачи дисциплины «квантовая химия» и ожидаемые результаты.
2. Известные квантовые химики 20 века.
3. Известные квантовые химики 21 века.
4. Квантовые химики США.
5. Квантовые химики Британии.
6. Квантовые химики Германии.
7. Квантовые химики СССР.
8. Знаменитые квантовые химики АН.

9. Знаменитые квантовые химики ВУЗов.
10. Современные достижения квантовой химии.
11. Исторические предпосылки для возникновения квантовой химии.
12. Какие задачи может решать квантовая химия?
13. Что является фундаментом квантовой химии?
14. Какие новые задачи стоят перед квантовой химией?
15. Перспективные пути развития квантовой химии?
16. Адронная химия.
17. Философские проблемы квантовой химии.
18. Преподавание квантовой химии у нас и за рубежом. В чем отличия?
19. Насколько важны практические расчеты в изучении квантовой химии?
20. Квантовая биохимия. В чем суть?
21. Квантовые химики ИОХа.
22. Квантовые химики ИНЭОСа.
23. Квантовые химики университета Дружбы Народов.
24. Квантовые химики Иркутска.
25. Квантовые химики Казани.

Примерные вопросы для тестов

Тема 1. Введение в квантовую химию.

1. Сформулировать основные цели и задачи квантовой химии.
2. Ученые, которые внесли наиболее значимый вклад в развитие науки и их заслуги.
3. Как выглядит соотношение Леонарда Эйлера (1707-1783), полученное им в 1748 году ?
4. Смысл адиабатического приближения?
5. Существенный недостаток метода самосогласованного поля (ССП)?

Тема 3. Всевалентные полуэмпирические методы квантовой химии.

1. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием.
2. Параметризация CNDO/2 .
3. Разделение энергии по Фишеру и Кольмару.
4. Параметризация CNDO/S .
5. Параметризация MINDO/3 .

6.3. Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации

Примерные вопросы к экзамену:

1. Дать основные цели и задачи квантовой химии.
2. Описать историю развития идей квантовой химии.
3. Ученые, которые внесли наиболее значимый вклад в развитие квантовой химии и их заслуги.
4. Основное содержание метода ВС.
5. Основное содержание метода МО.
6. Метод Молекулярных Орбиталей Хюккеля (МОХ).
7. Расчет циклопропеноидальной системы в рамках МОХ.
8. Молекула бутадиена в рамках МОХ.
9. Расчет молекулы циклобутадиена в рамках МОХ.
10. Расчет молекулы бензола в рамках МОХ.
11. Правило Хюккеля. Альтернативные системы.
12. Вычисление коэффициентов в несвязывающих МО.
13. Применение метода Хюккеля к расчету соединений, содержащих гетероатомы.
14. Пути совершенствования метода МОХ.
15. ЕНТ (Extend Huckel Theory) или метод Гофмана.
16. Метод Паризера-Парра-Поппа.
17. Всевалентные полуэмпирические квантовохимические методы. Общие положения.
18. Приближение CNDO (Complete Neglect of Differential Overlap)
19. Параметризация CNDO/2.
20. Метод CNDO/S.
21. Параметризации CNDO/SW, CNDO/BW и CNDO/FK.
22. INDO (Intermediate Neglect of Differential Overlap).
23. MINDO (MINDO/3) .
24. Приближение NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap).
25. Современные вычислительные пакеты, включающие приближения PM3 , MNDO, ZINDO и др.
26. Что представляет собой анализ заселенностей по Малликену?
27. Какие расчеты называются неэмпирическими?
28. В чем заключаются достоинства полуэмпирических методов по сравнению с неэмпирическими ?
29. В чем специфика неограниченного метода Хартри-Фока (unrestrictedHF (UHF))?
30. В чем специфика ограниченного метода Хартри-Фока (restrictedHF (RHF))?

Рабочая программа дисциплины "Квантовая химия" по направлению подготовки (специальности) "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 8
---	--------

31. Методы теории функционала плотности.
32. В чем заключаются преимущества метода DFT по сравнению с неэмпирическими?
33. Что представляет собой корреляционно-согласованный базисный набор в методе DFT?
34. Понятие поверхности потенциальной энергии.
35. Привести пример ППЭ. Дать обоснованные комментарии.
36. Какая точка на ППЭ называется седловой ?
37. Определить понятие «координата реакции».
38. Как сформировать исходный файл для расчетов в рамках программы GAMESS ?
39. Как сформировать исходный файл для расчетов в рамках программы GAUSSIAN ?
40. Как осуществить расчет частот и форм нормальных колебаний в рамках программы GAUSSIAN?
41. Перициклические реакции.
42. Электроциклические реакции.
43. Сигматропные перегруппировки.
44. Качественная теория реакционной способности.
45. Молекулярная динамика и химическая кинетика.
46. Атомы в молекулах. (Взгляды В.М.Татевского, Р.Бейдера и др.)
47. Современные направления развития квантовохимических исследований.

6.4. Критерии оценивания

Критерии оценивания ответа на экзамене:

"Отлично" - студент показал глубокое знание учебно-программного материала. Исчерпывающе, последовательно, грамотно и логически стройно его изложил. Смог самостоятельно сделать необходимые обобщения и выводы. В соответствии с картой компетенций демонстрирует обоснованный выбор приемов саморегуляции при выполнении деятельности в условиях неопределенности;

"Хорошо" - студент знает учебно-программный материал, грамотно и по существу излагает его, не допускает существенных неточностей в ответе на вопрос. Может правильно применить теоретические положения и владеет необходимыми навыками при выполнении практических задач. Демонстрирует возможность и обоснованность реализации приемов саморегуляции при выполнении деятельности в конкретных заданных условиях;

"Удовлетворительно" - студент освоил основной материал, но не знает отдельных деталей, допускает неточности, владеет отдельными приемами саморегуляции, но допускает существенные ошибки при их реализации, не учитывая конкретные условия и свои возможности при принятии решений;

"Неудовлетворительно" - студент не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, владеет информацией об отдельных приемах саморегуляции, но не умеет реализовывать их в конкретных ситуациях.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1. Рекомендуемая литература

7.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Ресурс
Л1.1	Цирельсон В. Г.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=95498	Москва: Лаборатория знаний, 2021	ЭБС
Л1.2	Барановский, В. И.	Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие https://e.lanbook.com/book/113631	СанктПетербург: Лань, 2019	ЭБС
Л1.3	Давыдов А. С.	Квантовая механика: монография (https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=499379)	Москва : Наука, 1973	ЭБС
Л1.4	Свиридов В. В., Свиридов А. В.	Физическая химия (https://e.lanbook.com/book/168989)	Санкт- Петербург : Лань, 2021	ЭБС

7.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Ресурс
Л2.1	Давыдов А. С.	Квантовая механика: учебное пособие для университетов	Москва : Физматгиз, 1963	
Л2.2	Соломоник В. Г.	Квантово-химические расчеты строения и колебательно-вращательных спектров двухатомных молекул (http://e.lanbook.com/books/element.php? pl1_cid=25&pl1_id=4501)	Иваново : ИГХТУ, 2008	ЭБС
Л2.3	Андронов А. А., Витт А. А., Хайкин С. Э., Железцов Н. А.	Теория колебаний (https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=123658)	Москва : Наука, 1981	ЭБС

Рабочая программа дисциплины "Квантовая химия" по направлению подготовки (специальности) "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»			стр. 9	
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Ресурс
Л2.4	Абаренков И. В., Братцев В. Ф., Тулуб А. В.	Начала квантовой химии: [учебное пособие для университетов по специальности "Химия"]	Москва: Высшая школа, 1989	
Л2.5	Жидомиров Г. М., Багатурьянц А. А., Абронин И. А.	Прикладная квантовая химия: расчеты реакционной способности и механизмов химических реакций	Москва: Химия, 1979	
7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"				
Э1	eLIBRARY.RU [Электронный ресурс] : электронная библиотека / Науч. электрон.б-ка. – Москва, 1999 – . – Доступ к полным текстам после регистрации из сети ЧелГУ. – URL: http://elibrary.ru/defaultx.asp . – Яз. рус., англ. (163 назв. по подписке и более 3000 в свободном доступе). eLIBRARY			
Э2	Znanium.com [Электронный ресурс] : электронно-библиотечная система (ЭБС) / Научно- издательский центр ИНФРА-М. – Москва, 2002 – . – Режим доступа: http://znanium.com/ . Доступ открыт к книгам основной коллекции. После регистрации из сети университета доступ возможен с любого устройства, с выходом в Интернет.			
Э3	Лань [Электронный ресурс] : электронно-библиотечная система (ЭБС). – Санкт-Петербург, 2010 – . – Доступ к полным текстам с любого компьютера, после регистрации из сети ЧелГУ. – URL: http://e.lanbook.com/			
Э4	Университетская библиотека онлайн [Электронный ресурс] : электронно-библиотечная система (ЭБС) / ООО ДиректмедиаПабблишинг. – Москва, 2001 – . – Доступ к полным текстам с любого компьютера, после регистрации из сети ЧелГУ – URL: http://biblioclub.ru/			
7.3 Перечень информационных технологий				
7.3.1 Программное обеспечение				
Adobe Connect Acrobat				
LMS Moodle				
MS Office365				
Adobe Reader				
Visual Studio				
WinDjView				
7.3.2 Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы				
1. Электронный каталог научной библиотеки ЧелГУ [Электронный ресурс]: база данных / Челяб. гос. ун-т. - Челябинск, 1992 - .				
2. Национальная электронная библиотека (НЭБ) (https://rusneb.ru/) Национальная электронная библиотека (НЭБ) : объединенный электронный каталог фондов российских библиотек : сайт. – URL: http://нэб.рф . – Режим доступа: из читальных залов библиотеки ЧелГУ. – Текст : электронный.				
3. Президентская библиотека (https://www.prlib.ru/) Президентская библиотека : электронная национальная библиотека : сайт / ФГБУ Президентская библиотéка имени Б. Н. Ёльцина. – СанктПетербург, 2009 – . – URL: https://www.prlib.ru/ . – Текст : электронный.				
4. Web of Science (https://apps.webofknowledge.com) Web of Science : мультидисциплинарная реферативная база данных / компания Thomson Reuters. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей ЧелГУ. – Текст : электронный.				
5. Scopus (https://www.scopus.com) Scopus : реферативная база данных / Elsevier BV. – URL: http://www.scopus.com/ . – Яз. англ. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей ЧелГУ. – Текст : электронный.				

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Для реализации дисциплины используются учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения.

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно- наглядных пособий (демонстрационный набор атомов, таблица Менделеева).

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с подключением к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета.

1. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа

Рабочая программа дисциплины "Квантовая химия" по направлению подготовки (специальности) "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 10
Основное оборудование:	
Количество посадочных мест – 50, учебная мебель, мультимедийный Проектор EPSON EB-X41, экран с электроприводом Lumen, активная акустическая система Microlabsolo-6с, ПК INTEL E 2140 ФОРМОЗА МОНИТОР TFT 17"Acer 1716 Fs (700;1.5ms, 1280x1024), компьютер для работ с деловыми и аналитическими программами Монитор TFT17"LGL1718S.	
Учебно-наглядные пособия:	
Мультимедийная презентация, таблица Менделеева.	
Программное обеспечение:	
MS Windows XP Professional SP2 для ВУЗов. Лицензии бессрочные. Гос. Контракт № 300 от 08.10.2008 г., MS Office 2007. Лицензии бессрочные. Лицензия № 44664774 от 09.04.2008 г., ПО «Антивирус Касперского» Лицензионный договор № 1013/К-2773 от 11.12.2017 г.	
2. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа	
Основное оборудование:	
Количество посадочных мест – 44, учебная мебель, плазменный телевизор LG 50PV350 50", ноутбук iRUPatriot 707 coreWin8 – переносной, акустическая система.	
Учебно-наглядные пособия: мультимедийная презентация.	
Программное обеспечение:	
MS Office 2010 Pro. (№ лицензии: 48780632. Лицензионное соглашение Open License 68753219ZZE1307. Дата с 11.07.2011.), PSPP (свободное программное обеспечение, лицензия GNUGPL).	
3. Учебная аудитория для проведения лабораторных занятий	
Основное оборудование: специализированная эргономичная мебель для работы за компьютером. Автоматизированные рабочие места на 11 обучающихся, 1 преподавателя. 12 ПК с лицензионным программным обеспечением. Магнитно-маркерная доска. Интерактивная доска SMARTBoard 660 диагональ 64"/162/6 см. Проектор INFOCUSIN 36. Акустическая система 2.0 Sven SPS-678.	
Программное обеспечение: MS Windows XP Professional SP2 для ВУЗов. Лицензии бессрочные. Партия № PC 545926 от 20.12.2007 г.	
MS Office 2007. Лицензии бессрочные. Лицензия № 44664774 от 09.04.2008 г.	
MS Windows 7 Professional. Лицензии бессрочные. Лицензия № 48382516 от 10.11.2010 г.	
MS Office 2010. Лицензии бессрочные. Лицензия № 48382516 от 10.11.2010 г.	
MS Windows 10. Лицензии бессрочные. Гос. Контракт № АЭ-44/57/18 от 30.10.2018 г.	
MSOffice 2016. Лицензии бессрочные. Гос. Контракт № АЭ-44/57/18 от 30.10.2018 г.	
4. Помещение для самостоятельной работы: Читальный зал № 1	
Основное оборудование:	
Количество посадочных мест – 50, 5 персональных компьютеров с подключением в сеть «Интернет», неограниченный доступ к ЭБС и БД, учебная мебель, кондиционер.	
Программное обеспечение:	
Microsoft Windows 10 Pro. (Лицензии бессрочные. Договор № АЭ-223/28/18), MicrosoftOffice 2016 Pro (Лицензии бессрочные. Договор № АЭ-223/28/18), Консультант Плюс (Соглашение о сотрудничестве № 31 от 20.05.2003 с региональным информационным центром общероссийской сети распространения правовой информации), ПО «Антивирус Касперского» (Лицензионный договор № 1013/К-2773 от 11.12.2017 г.).	
Или иные, удобные для обучающегося, помещения для самостоятельной работы с компьютерной техникой и с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно- образовательную среду университета	

9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Основными видами самостоятельной работы студентов являются: работа с бумажными источниками информации (конспектом, книгой, методическими указаниями), работа с источниками сети Интернет и теми программными продуктами, которые рекомендованы преподавателем.

Изучать курс рекомендуется по темам в соответствии с программой дисциплины равномерно в течение всего семестра. Не следует переходить к изучению последующей темы, пока материал предыдущей темы не усвоен.

Изучать материал, относящийся к данной теме, следует по одному или нескольким из рекомендованных учебников. Для поиска необходимых сведений в учебнике можно использовать предметный указатель в конце книги.

При изучении материала по аспектам лекций следует обращать внимание на приводимые в лекциях ссылки сети Интернет. Студенту следует больше “экспериментировать” с ними, изучать справочную систему, различные возможности и сервисы соответствующих сайтов. Особое внимание необходимо уделять англоязычным ресурсам, поскольку подавляющее большинство научной информации публикуется на английском языке. При использовании подобных ресурсов

не следует «бояться» английского языка, при наличии затруднений желательно пользоваться онлайн переводчиками и/или словарями.

Перед осуществлением любого поиска информации следует тщательно продумывать стратегию: внимательно подходить к выбору ключевых слов, заранее продумывать их логические комбинации, знакомиться со справочной системой того или иного инструмента поиска и т.д. В процессе поиска необходимо обращать внимание на релевантность выдаваемых в процессе поиска документов. При поиске информации в реферативных базах данных желательно запоминать/записывать фамилии авторов работающих по интересующей студента тематике и осуществлять поиск других работ данных авторов. После каждого поиска необходимо детально фиксировать информацию о найденных документах (указывать когда искали, где искали, какие ключевые слова использовали и т.д.). Это все относится как к текущей работе, так и подготовке к написанию тестов и рефератов.

В случае применения при обучении дисциплины электронного обучения, дистанционных образовательных технологий общение обучающихся и преподавателя осуществляется в режиме как реального (программа Microsoft Teams), так и отложенного времени (система дистанционного обучения Moodle, электронная почта).

Большую часть времени обучающиеся самостоятельно работают с учебно-методическими материалами. Студенты имеют возможность консультироваться с преподавателем по всем вопросам, возникающим в ходе самостоятельной работы посредством электронной почты, сообщений в Moodle и Skype.

Доступ обучающегося к учебным ресурсам в режиме отложенного времени, самостоятельной работы осуществляется через сеть Интернет в удобном для него месте, времени и темпе.

При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья электронное обучение (ЭО), дистанционные образовательные технологии (ДОТ) предусматривают возможность приема-передачи информации в доступных для них формах.

Реализация дисциплины с применением ЭО и ДОТ осуществляется на основании «Положения о реализации основных и дополнительных образовательных программ с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Челябинский государственный университет», «Положения о порядке зачета обучающимися по основным профессиональным образовательным программам высшего образования в ФГБОУ ВО «ЧелГУ» результатов освоения в организациях, осуществляющих образовательную деятельность, учебных предметов, курсов, дисциплин (модулей), практик, дополнительных образовательных программ» посредством электронной информационно-образовательной среды ФГБОУ ВО «ЧелГУ».

В исключительных случаях (форс-мажор и т.п.) при реализации образовательной деятельности с применением ЭО, ДОТ могут применять компоненты, не входящие в перечень электронной информационно-образовательной среды.

10. СПЕЦИАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ОБУЧАЮЩИМИСЯ С ИНВАЛИДНОСТЬЮ И ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Освоение дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с использованием специальных технических средств и голо информационных технологий, предоставляемых Ресурсным учебно-методическим центром по обучению инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья ЧелГУ по запросу обучающегося.

1. Мобильные специальные технические средства для лиц с нарушениями зрения: портативный компьютер с вводом/выводом шрифтом Брайля с синтезатором речи «EIBraile-W14J G2»; ноутбуки с программной экранного доступа NVDA; электронные увеличители для удаленного просмотра; видеоувеличители портативные; тифлоплеер; цифровые диктофоны.

2. Мобильные специальные технические средства для лиц с нарушениями слуха: система свободного звукового поля со встроенной совместимостью с FM-устройствами; радиоклассы «Сонет-PCM» с передатчиком, заушным индуктором и индукционной петлей; система информационная для слабослышащих переносная «Исток» А2 со встроенным плеером – звуковым информатором; документ-камера; программируемые слуховые аппараты индивидуального пользования.

3. Ассистивные информационные технологии: программное обеспечение экранного доступа с синтезом речи NVDA; программы экранного увеличения; программы речевого синтеза для компьютеров и ноутбуков; программы речевого синтеза для мобильных устройств; экранная клавиатура; экранная лупа.

При необходимости для обучающихся с нарушениями зрения на рабочих местах для проведения практических или лабораторных занятий устанавливается специальное программное обеспечение (программа речевой навигации NVDA, речевые синтезаторы, экранные лупы).

В учебные аудитории обеспечивается беспрепятственный доступ для обучающихся инвалидов и обучающихся с ограниченными возможностями здоровья. В каждой аудитории, где обучаются инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья, предусматривается соответствующее количество мест для обучающихся с учетом нарушений их здоровья.

Для освоения дисциплины инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется доступ к печатным источникам, имеющимся в научной библиотеке ЧелГУ, с помощью специальных технических средств; доступ к электронным источникам, представленным в форме электронного документа в фонде научной библиотеки ЧелГУ или электронно-библиотечных системах, с помощью специальных технических и программных средств (рабочее место для незрячего пользователя с программным обеспечением экранного доступа с синтезом речи NVDA,

рабочее место с компьютерным роллером и клавиатурой CleVu с большими кнопками и с разделяющей клавиши накладкой). Учебно-методические материалы для обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа,
- в форме аудиофайла,
- в печатной форме шрифтом Брайля.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа,
- в форме аудиофайла.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья освоение дисциплины может быть частично или полностью осуществлено с использованием дистанционных образовательных технологий (Moodle, Adobe Connect Pro и пр.).

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья используется индивидуальная работа. Под индивидуальной работой подразумевается две формы взаимодействия с преподавателем: индивидуальная учебная работа (консультации), т.е. дополнительное разъяснение учебного материала и углубленное изучение материала с теми обучающимися, которые в этом заинтересованы, и индивидуальная воспитательная работа. Индивидуальные консультации направлены на индивидуализацию обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или обучающимся с ограниченными возможностями здоровья.

При проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине обеспечивается выполнение следующих дополнительных требований в зависимости от индивидуальных особенностей, обучающихся:

- а) инструкция по порядку проведения процедуры оценивания предоставляется в доступной форме (устно, в письменной форме, в письменной форме шрифтом Брайля, устно с использованием услуг сурдопереводчика);
- б) доступная форма предоставления заданий оценочных средств (в печатной форме, в печатной форме увеличенным шрифтом, в печатной форме шрифтом Брайля, в форме электронного документа, задания зачитываются ассистентом, задания предоставляются с использованием сурдоперевода);
- в) доступная форма предоставления ответов на задания (письменно на бумаге, набор ответов на компьютере, письменно шрифтом Брайля, с использованием услуг ассистента, устно).

При проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями. Эти средства могут быть предоставлены ЧелГУ или могут использоваться собственные технические средства. При необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на задания, процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Проведение процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья допускается с использованием дистанционных образовательных технологий.