

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебной работе,  
качеству образования – пер-  
вый проректор

Хагуров Т.А.

«02» июня 2026 г.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Б1.О.08 «КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ»**

|                                   |                                                     |
|-----------------------------------|-----------------------------------------------------|
| Направление подготовки –          | 04.04.01 Химия                                      |
| Направленность (профиль) –        | «Перспективные соединения и материалы на их основе» |
| Форма обучения – очная            |                                                     |
| Квалификация выпускника – магистр |                                                     |

Краснодар 2026

**Рабочая программа дисциплины Б1.О.08 «Компьютерная химия»** составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.04.01 – Химия.

Программу составил:

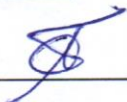
Волынкин В.А., зав. кафедрой общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии, к.х.н. 

Рабочая программа дисциплины Б1.О.08 «Компьютерная химия» утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии протокол № 10 от «27» апреля 2026 г.

Заведующий кафедрой  Волынкин В.А.

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий, протокол № 7 «29» апреля 2026 г.

Председатель УМК факультета Беспалов А.В.



Рецензенты:

Крапивин Г.Д, главный научный сотрудник ЦКП «ИЦПиХТ»  
ФГБОУ ВО «КубГТУ», д.х.н., профессор

Болотин С.Н, зав. кафедрой экологии и природопользования  
ФГБОУ ВО «КубГУ», к.х.н, доцент

## **1. Цели и задачи освоения дисциплины**

### **1.1 Цель освоения дисциплины**

- познакомить студентов с возможностями математического моделирования в химии, его применения для решения химических задач и привить им навыки работы с соответствующим программным обеспечением.

### **1.2. Задачи дисциплины**

- научить студентов применению методов математического моделирования для решения химических задач, компьютерного моделирования структур молекул и химических процессов
- научить грамотно применять полученные знания при решении ряда задач, возникающих при исследованиях строения молекул. Например: классификация электронных термов атомов и молекул; определение симметрии нормальных колебаний молекулы и их активности в ИК и КР спектрах; определение симметрии возможной геометрической конфигурации молекулы и т.д.

### **1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы**

Дисциплина «Компьютерная химия» относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» (Б1.О.08).

В соответствии с рабочим учебным планом дисциплина изучается на 1 курсе по очной форме обучения. Вид промежуточной аттестации: зачет во 2 семестре.

Для ее изучения необходимо предварительное изучение курсов бакалавриата «Неорганическая химия», «Кристаллография» и «Строение вещества».

Знания и навыки, полученные в результате освоения данного курса, могут быть использованы при решении различных задач общеобразовательных и специальных химических дисциплин, изучении дисциплин Электронная и колебательная спектроскопия, Теоретические закономерности и стратегия синтеза новых материалов, в научно-исследовательской работе студентов.

### **1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций:

| Код и наименование индикатора достижения компетенции                                                                                                                               | Результаты обучения по дисциплине                                                                                                                                                                                               |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ОПК-3 - Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.                              |                                                                                                                                                                                                                                 |
| ИОПК-3.1. Использует современные ИТ технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.                                                                  | Знать теоретические основы современных информационных технологий, в том числе принципы организации систем и баз данных в профессиональной области                                                                               |
|                                                                                                                                                                                    | Уметь анализировать, оптимизировать и применять современные информационные технологии при решении научных задач                                                                                                                 |
|                                                                                                                                                                                    | Владеть современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении информации при проведении самостоятельных научных исследований                       |
| ИОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.                              | Знать теоретические основы работы используемых программных продуктов                                                                                                                                                            |
|                                                                                                                                                                                    | Уметь правильно применять необходимые методы расчетов в соответствии с поставленной задачей.                                                                                                                                    |
|                                                                                                                                                                                    | Владеть программным обеспечением для расчетов атомных и молекулярных систем.                                                                                                                                                    |
| ИОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ и материалов, а также процессов с их участием. | Знать основные приемы анализа и планирования научного исследования, а также основные понятия квантовой химии, используемые при изучении атомных и молекулярных систем                                                           |
|                                                                                                                                                                                    | Уметь абстрактно мыслить, использовать методы анализа и синтеза в научной работе, соотносить теоретические положения с экспериментальными данными, применять полученные знания при решении задач исследования строения молекул. |
|                                                                                                                                                                                    | Владеть способностью анализировать разнородные экспериментальные факты, обобщать значительное число данных, осмысливать теоретические положения для решения задач в сфере профессиональной деятельности                         |

## 2. Структура и содержание дисциплины

### 2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зач. ед. (144 часа), их распределение по видам работ представлено в таблице.

| Вид учебной работы                                                    | Всего часов                          | Семестры (часы) |             |          |          |
|-----------------------------------------------------------------------|--------------------------------------|-----------------|-------------|----------|----------|
|                                                                       |                                      | 2               |             |          |          |
| <b>Контактная работа, в том числе:</b>                                |                                      |                 |             |          |          |
| <b>Аудиторные занятия (всего):</b>                                    | <b>48</b>                            | <b>48</b>       |             |          |          |
| Занятия лекционного типа                                              | 16                                   | 16              | -           | -        | -        |
| Лабораторные занятия                                                  | 32                                   | 32              | -           | -        | -        |
| Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)            | -                                    | -               | -           | -        | -        |
| <b>Иная контактная работа:</b>                                        |                                      |                 |             |          |          |
| Контроль самостоятельной работы (КСР)                                 | -                                    | -               |             |          |          |
| Промежуточная аттестация (ИКР)                                        | 0,2                                  | 0,2             |             |          |          |
| <b>Самостоятельная работа, в том числе:</b>                           |                                      |                 |             |          |          |
| Курсовая работа                                                       | -                                    | -               | -           | -        | -        |
| Проработка учебного (теоретического) материала                        | 40                                   | 40              | -           | -        | -        |
| Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций) | 30                                   | 30              | -           | -        | -        |
| Реферат                                                               | 10                                   | 10              | -           | -        | -        |
| <b>Контроль:</b>                                                      |                                      |                 |             |          |          |
| Подготовка к экзамену                                                 |                                      |                 |             |          |          |
| <b>Общая трудоемкость</b>                                             | <b>час.</b>                          | <b>144</b>      | <b>144</b>  | <b>-</b> | <b>-</b> |
|                                                                       | <b>в том числе контактная работа</b> | <b>48,2</b>     | <b>48,2</b> |          |          |
|                                                                       | <b>зач. ед</b>                       | <b>4</b>        | <b>4</b>    |          |          |

### 2.2 Структура дисциплины.

Распределение видов учебной работы и их трудоёмкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые во 2 семестре (для студентов ОФО)

| №  | Наименование разделов (тем)                                  | Количество часов |                   |    |           |                      |
|----|--------------------------------------------------------------|------------------|-------------------|----|-----------|----------------------|
|    |                                                              | Всего            | Аудиторная работа |    |           | Внеаудиторная работа |
|    |                                                              |                  | Л                 | ПЗ | ЛР        |                      |
| 1. | Строение атома, одноэлектронный атом, многоэлектронные атомы |                  | 4                 |    | 4         | 15,8                 |
| 2. | Теория химической связи                                      |                  | 4                 |    | 8         | 20                   |
| 3. | Введение в квантово-химические методы вычислений             |                  | 4                 |    | 8         | 20                   |
| 4. | Электронная корреляция                                       |                  | 2                 |    | 4         | 20                   |
| 5. | Теория функционала плотности                                 |                  | 2                 |    | 8         | 20                   |
|    | <b>ИТОГО по разделам дисциплины</b>                          |                  | <b>16</b>         |    | <b>32</b> | <b>95,8</b>          |
|    | Контроль самостоятельной работы (КСР)                        |                  | -                 | -  | -         | -                    |
|    | Промежуточная аттестация (ИКР)                               | 0.2              | -                 | -  | -         | -                    |
|    | Подготовка к текущему контролю                               |                  | -                 | -  | -         | -                    |
|    | Общая трудоемкость по дисциплине                             | 144              | -                 | -  | -         | -                    |

Примечание: Л – лекции, ПЗ – практические занятия / семинары, ЛР – лабораторные занятия, СРС – самостоятельная работа студента

## 2.3 Содержание разделов дисциплины

### 2.3.1 Занятия лекционного типа

| № раздела | Наименование раздела                              | Содержание раздела                                                                                                                 | Форма текущего контроля                   |
|-----------|---------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------|
| 1         | 2                                                 | 3                                                                                                                                  | 4                                         |
| 1         | Введение в квантово-химические методы вычислений. | Основные принципы квантовой механики. Атомные орбитали. Квантовые числа. Многоэлектронные атомы. Свойства многоэлектронных атомов. | Коллоквиум                                |
| 2         | Теория химической связи.                          | Метод МО ЛКАО. Базисные наборы атомных орбиталей.                                                                                  | Рефераты, доклады                         |
| 3         | Введение в квантово-химические методы вычислений  | Полуэмпирические методы. Симметрия молекулярных систем. Программное обеспечение расчетов.                                          | Коллоквиум с докладами в виде презентации |
| 4         | Электронная корреляция.                           | Электронная корреляция. Методы учета электронной корреляции.                                                                       |                                           |
| 5         | Теория функционала плотности.                     | Теория функционала плотности.                                                                                                      |                                           |

### 2.3.2 Занятия семинарского типа

(учебным планом занятия семинарского типа не предусмотрены)

### 2.3.3 Лабораторные занятия

| №  | Наименование лабораторных работ                                                                                    | Форма текущего контроля                           |
|----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|
| 1  | 3                                                                                                                  | 4                                                 |
| 1. | <b>Hyper Chem.</b> Оптимизация геометрии, определение активных центров молекулы. Определение потенциала ионизации. | <i>Отчет по лаб. работе</i>                       |
| 2. | <b>Hyper Chem.</b> Внутреннее вращение. Расчет конформаций.                                                        | <i>Отчет по лаб. работе</i>                       |
| 3. | <b>Hyper Chem.</b> Расчет дипольного момента, энтальпии образования, сродства к электрону.                         | <i>Решение задач</i>                              |
| 4. | <b>GAMESS.</b> Составление входного файла. Задание параметров расчета.                                             | <i>Отчет по лаб. работе</i>                       |
| 5. | <b>GAMESS.</b> Расчет энергии, оптимизация геометрии, получение информации об углах и длинах связей.               | <i>Отчет по лаб. работе</i>                       |
| 6. | <b>GAMESS.</b> Получение спектральной информации (ИК, ЯМР и т.д.).                                                 | <i>Отчет по лаб. работе</i>                       |
| 7. | Программа <b>MOPAC.</b> Основы работы.                                                                             | <i>Коллоквиум с докладами в виде презентации.</i> |
| 8. | Самостоятельная работа №1                                                                                          | <i>КР</i>                                         |

### 2.3.4 Примерная тематика курсовых работ

Курсовые работы – не предусмотрены

### 2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

| № | Вид СРС                      | Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы                                                                                                                                                                                                                   |
|---|------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1 | 2                            | 3                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| 1 | Теоретическая самоподготовка | Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. 89 с.<br>Интернет ресурсы по дисциплине, в том числе указанные в п.б. |
| 2 | Подготовка к ЛР              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| 3 | Реферат                      |                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| 4 | Доклады, презентации         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) 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.

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.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

### **3. Образовательные технологии**

В ходе изучения дисциплины предусмотрено использование следующих образовательных технологий: лекции, практические занятия, проблемное обучение, самостоятельная работа студентов.

Для формирования профессиональных компетенций в процессе освоения курса используется технология профессионально-развивающего обучения, предусматривающая не только передачу теоретического материала, но и стимулирование и развитие продуктивных познавательных действий студентов (на основе психолого-педагогической теории поэтапного формирования умственных действий). Компетентностный подход в рамках преподавания дисциплины реализуется в использовании интерактивных технологий и активных методов (проектных методик, разбора конкретных ситуаций) в сочетании с внеаудиторной работой. В процессе самостоятельной деятельности студенты осваивают и анализируют передовой опыт, используя имеющуюся литературу и информационные технологии, выступают с презентациями, накапливают портфолио разработок.

Информационные технологии, применяемые при изучении дисциплины: использование информационных ресурсов, доступных в информационно-телекоммуникационной сети Интернет.

Адаптивные образовательные технологии, применяемые при изучении дисциплины – для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

### **4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации**

Оценочные средства предназначены для контроля и оценки образовательных достижений обучающихся, освоивших программу учебной дисциплины «Компьютерная химия».

Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Оценочные средства включают контрольные материалы для проведения текущего контроля в форме тестовых заданий, доклада-презентации по проблемным вопросам, разно-

уровневых заданий, ситуационных задач и промежуточной аттестации в форме вопросов и заданий зачету.

**Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы**

### **Примерные темы рефератов, докладов, эссе**

1. Классификация термов атомов. Теория кристаллического поля. Расщепление атомных уровней в кристаллическом поле. Анализ расщепления *d*- и *f*-уровней в полях различной симметрии. Цис- и транс-влияние в комплексах переходных металлов.
2. Электронные состояния молекул. Классификация электронных состояний нелинейных молекул. Определение симметрии электронной волновой функции линейных молекул. Электронные состояния нелинейных молекул, вырожденные для высокосимметричных конфигураций ядер. Эффект Реннера-Теллера. Эффект Яна-Теллера.
3. Колебания молекул. Метод локальной симметрии. Определение колебательного представления произвольной многоатомной молекулы. Представления оператора дипольного момента и правила отбора. Правила отбора в ИК- и КР-спектрах. Построение симметризованных координат.
4. Влияние симметрии на протекание химических реакций. Определение симметрии возможного переходного состояния. Определение путей возможных внутримолекулярных перегруппировок. Модель Бейдера-Пирсона.
5. Кристаллы и квазикристаллы. Основные типы химической связи в кристаллах. Гомодесмические и гетеродесмические структуры. Критерий устойчивости структур. Кристаллические структуры координационных соединений. Общая характеристика молекулярных кристаллов. Особенности органических кристаллов.

### **Примеры вариантов контрольных работ, тестов**

#### **ВАРИАНТ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ № 1**

Для указанных молекул ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{HPO}_3$ ) нарисовать структуру, произвести оптимизацию геометрии с использованием всех доступных для данного типа методов (молекулярной механики, полуэмпирических, *ab initio*). Создать таблицу данных по энергии, длин связей и углов

для каждого метода. Полученные данные сравнить между собой и справочными данными. Сделать вывод об эффективности и адекватности различных методов.

## **Зачетно-экзаменационные материалы для промежуточной аттестации.**

### **Вопросы для подготовки к зачету**

1. Атомная орбиталь (АО) многоэлектронного атома. Точные и приближенные аналитические функции АО. Атомные орбиталь Слейтера – Зенера, двухэкспоненциальные (DZ) и гауссовские АО. Формирование базисов АО для неэмпирических расчетов и полуэмпирических расчетов.
2. Молекулярные системы. Использование приближения ССП Хартри – Фока в методе МО ЛКАО. Одноэлектронное уравнение Рутаана для закрытых оболочек. Одно- и многоцентровые интегралы межэлектронного взаимодействия.
3. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета. Выбор БАО для неэмпирических и полуэмпирических расчетов. Возможность расчета спектральных характеристик молекул. Влияние на результаты размера БАО.
4. Использование уравнений классической механики для описания молекулярных систем. Методы молекулярной механики (ММ). Описание основных типов взаимодействия в молекулярной системе. Понятие силового поля. Виды и назначения силовых полей MM2, AMBER, BIO для различных молекулярных систем. Сравнение метода ММ с другими расчетными методами.
5. Методы функционала плотности DFT. Связь полной энергии с функционалом матриц электронной плотности. Теорема Хоэнберга – Кона. Обменная и корреляционная части полной энергии. Параметризация метода.
6. Квантово-химический расчет электронных и молекулярных спектров молекул. Основные подходы и теоретические обоснования для расчета спектров УФ, ИК и ЯМР.
7. Многоэлектронные атомы. Спин-орбиталь одноэлектронной волновой функции и атома. Определитель Слейтера. Способ задания спин-орбитали атома в методах Хартри и Хартри – Фока. Сравнение двух моделей. Открытые и закрытые оболочки.
8. Многоэлектронные атомы. Межэлектронное отталкивание и способы его учета при решении уравнения Шредингера. Метод самосогласованного поля (ССП) Хартри-Фока. Одноэлектронные уравнения Хартри -Фока. Одно- и двухэлектронные интегралы.

9. Одноэлектронное уравнение Рутаана. Неэмпирические методы расчета молекул. Приближенные формы атомной орбитали. Выбор базиса атомных орбиталей (БАО). Использование примитивных (STO – NG) и сжатых валентно – расщепленных (STO M-NPG) БАО гауссовского типа. Включение в БАО поляризационных и диффузных АО.
10. Молекулярные системы. Применение теории симметрии для построения молекулярных волновых функций. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Связь молекулярной симметрии с типами неприводимых представлений на примере молекулы NH<sub>3</sub>.
11. Молекулярные системы. Использование приближения ССП Хартри – Фока в методе МО ЛКАО. Одноэлектронное уравнение Рутаана для закрытых оболочек. Одно- и многоцентровые интегралы межэлектронного взаимодействия.
12. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета. Выбор БАО для неэмпирических и полуэмпирических расчетов. Хартри-Фоковский предел точности неэмпирических расчетов.
13. Возможность расчета спектральных характеристик молекул. Возможность расчета структурных, физических и термодинамических характеристик молекул. Влияние на результаты размера БАО.
14. Неэмпирические методы расчета. Достоинства и недостатки. Электронная корреляция и ее вклад в полную энергию системы. Методы учета электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия (CI). Метод теории возмущений Меллера-Плессета (MP). Возмущения второго и четвертого порядка.
15. Уравнение ССП МО ЛКАО Рутаана. Полуэмпирические методы его расчета. Учет интегралов перекрывания. Основные положения метода INDO. Различные виды параметризации метода INDO. Необходимые исходные данные для расчета одно и двухэлектронных интегралов. Достоинства и недостатки метода.
16. Уравнение ССП МО ЛКАО Рутаана. Полуэмпирические методы его расчета. Основные положения метода CNDO. Различные виды параметризации метода CNDO. Возможность расчета возбужденных состояний (CNDO/S). Необходимые исходные данные для расчета одно и двухэлектронных интегралов.
17. Уравнение ССП МО ЛКАО Рутаана. Полуэмпирические методы его расчета. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием. Основные положения методов MNDO и AM1. Достоинства и недостатки.
18. Методы расчета молекул. Одноэлектронные уравнения Рутаана. Одно- и многоцентровые кулоновские и обменные интегралы и их вклады в полную энергию. Способы сокращения их числа в полуэм-

пирических методах

19. Полуэмпирические методы расчета. Нулевое дифференциальное перекрывание. Нарушение инвариантности уравнения Рутаана к операциям симметрии. Метод CNDO.
20. Использование уравнений классической механики для описания молекулярных систем. Методы молекулярной механики (ММ). Описание основных типов взаимодействия в молекулярной системе. Понятие силового поля. Виды и назначения силовых полей ММ2, AMBER, BIO для различных молекулярных систем. Сравнение метода ММ с другими расчетными методами.
21. Методы функционала плотности DFT. Связь полной энергии с функционалом матриц электронной плотности. Теорема Хоэнберга –Кона. Обменная и корреляционная части полной энергии. Параметризация метода.
22. Квантово- химическое определение частот колебаний сложной молекулы. Нормальные колебания. Симметрия нормальных колебаний. Расчет количества колебаний с помощью теории групп на примере молекулы H<sub>2</sub>S или любой другой..
23. Квантово- химический расчет электронных и молекулярных спектров молекул. Основные подходы и теоретические обоснования для расчета спектров УФ, ИК и ЯМР.
24. Квантово- химический расчет теплот химической реакции в неэмпирических и полуэмпирических методах.

### **Критерии оценивания результатов обучения**

«зачтено»: студент владеет теоретическими знаниями по данному разделу, знает и понимает изученные концепции и теории, допускает незначительные ошибки; студент умеет правильно объяснять материал, иллюстрируя его примерами, умеет аргументировать собственную точку зрения.

«не зачтено»: материал не усвоен или усвоен частично, студент затрудняется привести примеры по данному разделу, довольно ограниченный объем знаний программного материала.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматрива-

ется использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

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

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.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

## **5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

### **5.1 Учебная литература**

1. 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>
2. В. Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для студентов вузов М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с.
3. Холанд А. Молекулы и модели : молекулярная структура соединений элементов главных групп / пер. с англ. Г. В. Гиричева, Н. И. Гиричевой . - М. : URSS : [КРАСАНД], 2011. - 382 с.
4. Минкин, Владимир Исаакович, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. Теория строения молекул : учебное пособие для студентов вузов / - 2-е изд., перераб. и доп. - Ростов н/Д : Феникс, 1997. - 558 с.
5. Грибов Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул. – Интеллект, 2010, 312 с.

## 5.2. Периодическая литература

1. Базы данных компании «Ист Вью» <http://dlib.eastview.com>
2. Журнал структурной химии
3. Координационная химия

## 5.3. Интернет-ресурсы, в том числе современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

### Электронно-библиотечные системы (ЭБС):

1. ЭБС «УНИВЕРСИТЕТСКАЯ БИБЛИОТЕКА ОНЛАЙН»  
[www.biblioclub.ru](http://www.biblioclub.ru)
2. ЭБС «ZNANIUM.COM» [www.znanium.com](http://www.znanium.com)
3. ЭБС «ЛАНЬ» <https://e.lanbook.com>

### Профессиональные базы данных:

1. Scopus <http://www.scopus.com/>
2. ScienceDirect [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)
3. Научная электронная библиотека (НЭБ) <http://www.elibrary.ru/>
4. Springer Journals <https://link.springer.com/>
5. zbMath <https://zbmath.org/>
6. "Лекториум ТВ" <http://www.lektorium.tv/>

### Ресурсы свободного доступа:

1. <http://www.gaussian.com>
2. <http://www.qchem.ru/>
3. <http://www.msg.ameslab.gov/gamess/>
4. <http://quant.distant.ru>

### Собственные электронные образовательные и информационные ресурсы КубГУ:

1. Среда модульного динамического обучения <http://moodle.kubsu.ru>
2. База учебных планов, учебно-методических комплексов, публикаций и конференций <http://mschool.kubsu.ru/>
3. Библиотека информационных ресурсов кафедры информационных образовательных технологий <http://mschool.kubsu.ru;>
4. Электронный архив документов КубГУ <http://docspace.kubsu.ru/>
5. Электронные образовательные ресурсы кафедры информационных систем и технологий в образовании КубГУ и научно-методического журнала "ШКОЛЬНЫЕ ГОДЫ" <http://icdau.kubsu.ru/>

## **6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

### **Методические указания и рекомендации к созданию презентации по теме магистерской работы для устных и стендовых научных докладов.**

При создании мультимедийной презентации следует руководствоваться следующими принципами:

- Прежде чем приступить к работе над презентацией, следует добиться полного понимания того, о чем вы собираетесь рассказывать.
- Презентация должна быть краткой, доступной и композиционно целостной.
- В презентации не должно быть ничего лишнего. Каждый слайд должен представлять собой необходимое звено повествования и работать на общую идею презентации.
- Продолжительность презентации со сценарием должна составлять не более 20-30 минут. Для демонстрации нужно подготовить примерно 20-25 слайдов (показ одного слайда занимает около 1 минуты, плюс время для ответов на вопросы слушателей).
- Не перегружайте слайды лишними деталями. Иногда лучше вместо одного сложного слайда представить несколько простых. Не следует пытаться "затолкать" в один слайд слишком много информации.
- Спецэффекты должны быть сведены к минимуму и использовать только с целью привлечь внимание зрителя к ключевым моментам демонстрации.
- Необходимо поддерживать единый стиль представления информации.
- Шрифты рекомендуется использовать стандартные - Times, Arial. Лучше всего ограничиться использованием двух или трех шрифтов для всей презентации.
- Вся презентация выполняется в одной цветовой палитре, обычно на базе одного шаблона.
- Информация должна быть по возможности представлена в виде графиков, схем, таблиц или списков.

### **Методические рекомендации преподавателям по методике проведения основных видов учебных занятий**

#### **Лекции**

##### *Методика чтения лекций*

Лекции являются одним из основных методов обучения по дисциплине, которые должны решать следующие задачи:

- изложить важнейший материал программы курса, освещающий основные моменты;
- развить у студентов потребность к самостоятельной работе над

учебной и научной литературой.

Главной задачей каждой лекции является раскрытие сущности темы и анализ ее главных положений. Рекомендуются на первой лекции довести до внимания студентов структуру курса и его разделы, а в дальнейшем указывать начало каждого раздела, суть и его задачи, а, закончив изложение, подводить итог по этому разделу, чтобы связать его со следующим.

### *Содержание лекций*

Содержание лекций определяется рабочей программой курса. Крайне желательно, чтобы каждая лекция охватывала и исчерпывала определенную тему курса и представляла собой логически вполне законченную работу. Лучше сократить тему, но не допускать перерыва ее в таком месте, когда основная идея еще полностью не раскрыта.

## **Лабораторные занятия**

### *Методика проведения лабораторных занятий*

Целями проведения лабораторных работ являются:

- установление связей теории с практикой в форме экспериментального подтверждения положений теории;
- обучение студентов умению анализировать полученные результаты;
- контроль самостоятельной работы студентов по освоению курса;
- обучение навыкам профессиональной деятельности

Цели лабораторного практикума достигаются наилучшим образом в том случае, если выполнению эксперимента предшествует определенная подготовительная внеаудиторная работа. Поэтому преподаватель обязан довести до всех студентов график выполнения лабораторных работ с тем, чтобы они могли заниматься целенаправленной домашней подготовкой.

Перед началом очередного занятия преподаватель должен удостовериться в готовности студентов к выполнению лабораторной работы путем короткого собеседования и проверки наличия у студентов заготовленных протоколов проведения работы.

## **Указания по самостоятельной работе.**

Самостоятельная работа составляет не менее 50% от времени, отводимого на изучение дисциплины. При самостоятельной работе студент должен ознакомиться с основными учебниками и учебными пособиями, дополнительной литературой и иными доступными литературными источниками. При работе с литературой по конкретным темам курса, в том числе указанным для самостоятельной проработки, основное внимание следует уделять важнейшим понятиям, терминам, определениям, для скорейше-

го усвоения которых целесообразно вести краткий конспект.

## 7. Материально-техническое обеспечение по дисциплине (модулю)

| Наименование специальных помещений                                                                                                                | Оснащенность специальных помещений                                                                                                                                    | Перечень лицензионного программного обеспечения                                                                             |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа                                                                                         | Мебель: учебная мебель<br>Технические средства обучения: интерактивная доска SMART Board, короткофокусный интерактивный проектор, ноутбук, меловая доска (ауд. 422С). | Microsoft Windows, Microsoft PowerPoint                                                                                     |
| Учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации | Мебель: учебная мебель<br>Технические средства обучения: интерактивная доска SMART Board, короткофокусный интерактивный проектор, ноутбук, меловая доска (ауд. 422С). | Microsoft Windows, Microsoft PowerPoint                                                                                     |
| Учебные аудитории для проведения лабораторных работ. Компьютерные классы.                                                                         | Мебель: учебная мебель<br>Технические средства обучения: терминальные станции с операционной системой Windows и необходимым программным обеспечением (ауд. 103).      | Microsoft Windows, Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint), ACD Labs Chems sketch freeware, GAMESS, HyperChem 8.0, MOPAC |
| Учебные аудитории для курсового проектирования (выполнения курсовых работ)                                                                        | Мебель: учебная мебель<br>Технические средства обучения: компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и до-                                      | Microsoft Windows, Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint), ACD Labs Chems sketch freeware, GAMESS, HyperChem 8.0, MOPAC |

|  |                                                                                                                                                                      |  |
|--|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
|  | <p>ступом в электронную информационно-образовательную среду университета (проводное соединение и беспроводное соединение по технологии Wi-Fi). (ауд. 428с, 431с)</p> |  |
|--|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|