МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.

_____ _____ 20___ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Основы квантовой химии Б1.В.ОД.1

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия
Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование
Квалификация выпускника: магистр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский

Автор(ы):
Маджидов Т.И.
Рецензент(ы):
Антипин И.С.

СОГЛАСОВАНО:
Заведующий(ая) кафедрой: Антипин И. С.
Протокол заседания кафедры No ___ от "____" _____ 201__г
Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:
Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__г

Регистрационный No 764317

Казань
2017

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Программу дисциплины разработал(а)(и) научный сотрудник, к.н. Маджидов Т.И. НИЛ Хемоинформатика и молекулярное моделирование Химический институт им. А.М. Бутлерова , Timur.Madzhidov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является получение теоретических знаний о современных представлениях квантовой химии, о методах расчета пространственной и электронной структуры молекул, а также приобретение умений и навыков работы с комплексами квантово-химических программ для решения задач, стоящих перед теоретической и экспериментальной химической наукой.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ОД.1 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Дисциплина относится к циклу М2 общенаучных дисциплин, его базовой части М2.Б.1.1

Преподавание опирается на основные разделы общенаучных дисциплин, приобретаемых в ходе изучения следующих дисциплин программ бакалавриата и специалитета: высшая математика, физика, неорганическая химия. Преподавание дисциплины опирается на знания, полученные студентами в ходе изучения дисциплин "Математические методы в химии", "Основы химии". "Основы квантовой химии" дает знания, необходимы для изучения дисциплин "Молекулярное моделирование", "Хемоинформатика", "Электронная и пространственная структура молекул", "Физические методы исследования органических соединений".

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-4	понимание философских концепций естествознания, роли естественных наук в выработке научного мировоззрения
ОК-5 (общекультурные компетенции)	Владение современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований
ПК-1 (профессиональные компетенции)	Наличие представлений о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии
ПК-11 (профессиональные компетенции)	владение основами делового общения, имеет навыки межличностных отношений и способен работать в научном коллективе
ПК-2 (профессиональные компетенции)	Знание основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основные современные методы квантовой химии (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности),
- иметь представления о приближениях и допущениях, использованных при разработке этих методов,
- иметь представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры и химических реакций

2. должен уметь:

- определять необходимую информацию для расчета электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов;
- ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов

3. должен владеть:

навыками:

- квантово-химических расчетов физико-химических характеристик веществ;
- квантово-химического моделирования химических реакций

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания на практике для решения теоретических и прикладных задач

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен во 2 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Квантовая химия. Оптимизация геометрии	2	1	2	2	0	
2.	Тема 2. Квантовая механика	2	2-3	4	2	0	Устный опрос

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
3.	Тема 3. Приближения квантовой химии. Метод Хартри.	2	3	2	0	0	Устный опрос
4.	Тема 4. Метод Хартри-Фока	2	4-5	2	4	0	Письменное домашнее задание
5.	Тема 5. Базисные наборы и псевдопотенциалы.	2	5-7	4	4	0	Контрольная работа
6.	Тема 6. Электронные характеристики	2	7-8	2	4	0	Устный опрос
7.	Тема 7. Полуэмпирические методы квантовой химии	2	9	2	2	0	Устный опрос
8.	Тема 8. Методы учета электронной корреляции. Методы теории функционала плотности.	2	10	2	2	0	Контрольная работа
9.	Тема 9. Выполнение и защита практической работы.	2	11	0	2	0	Творческое задание
.	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	Экзамен
	Итого			20	22	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Квантовая химия. Оптимизация геометрии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Теоретическая химия. Применение квантовой химии.Поверхность потенциальной энергии. Оптимизация геометрии: оптимизация нулевого порядка, оптимизация первого порядка (метод скорейшего спуска, метод сопряженных градиентов), оптимизация второго порядка (метод Ньютона-Рафсона, квазиньютоновские методы, метод GDIIS), критерии сходимости.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Тема практического занятия - оптимизация геометрии молекулы.

Тема 2. Квантовая механика

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Постулаты квантовой механики. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Линейные операторы. Существование волновой функции, измеряемые величины, средние значения физических величин. Принцип суперпозиции состояний. Решение задачи о состояниях одноэлектронного атома. Угловая и радиальная задачи: сферические и радиальные функции; орбитали s-, p-, d- типа; радиальные функции распределения электронной плотности. Принцип антисимметричности.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Семинарское занятие, дискуссия на тему: оптимизация геометрии и ее роль в квантовой химии.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Тема 3. Приближения квантовой химии. Метод Хартри.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Построение приближенных решений электронного уравнения. Приближение Борна-Оппенгеймера. Орбитальное приближение: приближение Хартри.

Тема 4. Метод Хартри-Фока

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Детерминант Слэйтера. Метод Хартри-Фока: общая идея, метод Хартри-Фока для систем с закрытыми и открытыми оболочками. Решение уравнений Хартри-Фока: численное решение, подход МО-ЛКАО, процедура самосогласования поля (SCF).

практическое занятие (4 часа(ов)):

Тема практического занятия - использование метода Хартри-Фока.

Тема 5. Базисные наборы и псевдопотенциалы.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Понятие базисного набора. Слэйтеровский тип орбиталей (STO). Гауссов тип орбиталей (GTO): STO-nG, попловские базисы, даннинговские базисы. Хартри-фоковский предел. Эффективные потенциалы ядер (псевдопотенциалы). Hay-Wadt. Суперпозиционная ошибка базисного набора.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Тема практического занятия - выбор базисного набора для расчетов.

Тема 6. Электронные характеристики

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Электронные характеристики: электронная плотность, электронная заселенность, матрица плотности, электростатический потенциал. Малликеновский анализ заселенностей: заселенность атома по Малликену, заселенность связи по Малликену, недостатки метода Малликена. Другие методы расчета заряда. Анализ заселенности на основании электростатического потенциала

практическое занятие (4 часа(ов)):

Тема первой практической работы - анализ зарядового и электронного распределения, тема второй работы - использование теории атомов в молекуле.

Тема 7. Полуэмпирические методы квантовой химии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Теория полуэмпирических методов. Интеграл перекрывания. Двухэлектронные интегралы - виды приближений. Приближения, используемые в полуэмпирических методах. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием: методы MNDO, AM1, PM3. Ограничения, общие для MNDO, AM1, PM3.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Тема практической работы ? предсказание структуры и различных энергетических характеристик сложных структур с использованием полуэмпирических методов.

Тема 8. Методы учета электронной корреляции. Методы теории функционала плотности.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Методы учета электронной корреляции: обменная корреляция, кулоновская корреляция. Методы теории функционала плотности. Основная идея DFT. Теорема существования Хоэнберга-Кона. ?Локальные? функционалы (LDA). ?Нелокальные? функционалы (NL). Гибридные функционалы. Эффективность методов DFT.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Тема практической работы - расчет энергии и параметров структуры молекул с использованием пост-хартрифоковских методов в программе Gaussian, сравнение результатов с данными метода Хартри-Фока и экспериментом.

Тема 9. Выполнение и защита практической работы.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Выполнение и защита практической работы (творческое задание).

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. Квантовая механика	2	2-3	подготовка к устному опросу	2	устный опрос
3.	Тема 3. Приближения квантовой химии. Метод Хартри.	2	3	подготовка к устному опросу	2	устный опрос
4.	Тема 4. Метод Хартри-Фока	2	4-5	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
5.	Тема 5. Базисные наборы и псевдопотенциалы.	2	5-7	подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
6.	Тема 6. Электронные характеристики	2	7-8	подготовка к устному опросу	2	устный опрос
7.	Тема 7. Полуэмпирические методы квантовой химии	2	9	подготовка к устному опросу	2	устный опрос
8.	Тема 8. Методы учета электронной корреляции. Методы теории функционала плотности.	2	10	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
9.	Тема 9. Выполнение и защита практической работы.	2	11	подготовка к творческому заданию	8	творческое задание
	Итого				30	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- демонстрацией слайдов с применением мультимедийной техники,
- проведение квантово-химического моделирования различных химических систем с использованием современного программного обеспечения,
- проведение устных опросов и дискуссий по темам лекций,
- выполнение творческих заданий и чтение докладов по результатам их выполнения,
- использование интернет-ресурсов для поиска важной фактической информации.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Квантовая химия. Оптимизация геометрии

Тема 2. Квантовая механика

устный опрос , примерные вопросы:

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Проведение устного опроса по материалам лекции " Тема 2. Квантовая механика" Темы вопросов для текущего контроля: Функция состояний и операторы наблюдаемых. Стационарное уравнение Шредингера. Основные свойства волновых функций. Нормировка волновых функций. Эрмитовы операторы, их собственные значения и собственные функции. Разложение по базису. Измерения в квантовой механике. Одномерное движение. Задача о гармоническом осцилляторе. Атом водорода.

Тема 3. Приближения квантовой химии. Метод Хартри.

устный опрос , примерные вопросы:

Проведение устного опроса по материалам лекции " Тема 3. Приближения квантовой химии. Метод Хартри. " Темы вопросов для текущего контроля: Построение приближенных решений электронного уравнения. Приближение Борна-Оппенгеймера.Орбитальное приближение: приближение Хартри.

Тема 4. Метод Хартри-Фока

домашнее задание , примерные вопросы:

Компьютерное моделирование структуры малых молекул с использованием метода Хартри-Фока. Минимизация энергии, сравнение расчетов с экспериментом. Анализ электронного распределения - характеристик молекулярных орбиталей, зарядов.

Тема 5. Базисные наборы и псевдопотенциалы.

контрольная работа , примерные вопросы:

Примерное задание для контрольной работы: 1.Рассчитайте методом Хюккеля в π-электронном приближении молекулу метиленилциклопропена. Нарисуйте уровни и симметрии молекулярных орбиталей. Является ли эта молекула ароматичной? 2. Запишите, как выглядит детерминант Слэйтера для представленного распределения электронов по МО уровням в ограниченном методе Хартри-Фока для открытых оболочек. Одинаковые ли это детерминанты? Какой вид электронной корреляции из-за этого возникает? 3. Представлен попловский базисный набор для углерода и водорода. Какой это базисный набор? Корректно ли будет его использовать для расчета аниона циклопропенилия?

Тема 6. Электронные характеристики

устный опрос , примерные вопросы:

Проведение устного опроса по материалам лекции "Тема 6. Электронные характеристики". Темы вопросов для текущего контроля: Основные понятия теории "Атомы в молекулах" Бейдера. Электронные характеристики: электронная плотность, электронная заселенность, матрица плотности, электростатический потенциал. Малликеновский анализ заселенностей. Анализ заселенности на основании электростатического потенциала

Тема 7. Полуэмпирические методы квантовой химии

устный опрос , примерные вопросы:

Проведение устного опроса по материалам лекции "Полуэмпирические методы квантовой химии" Темы вопросов для текущего контроля: Краткая характеристика полуэмпирические методы квантовой химии. Приближение нулевого дифференциального перекрывания. Параметризация полуэмпирических методов. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием: методы MNDO, AM1, PM3.

Тема 8. Методы учета электронной корреляции. Методы теории функционала плотности.

контрольная работа , примерные вопросы:

Примерное задание для контрольной работы: 1. В чем отличия локальных от нелокальных функционалов теории функционала плотности? 2. Каким образом может гессиан электронной плотности использоваться для анализа природы химической связи? 3. Корректно ли использовать полуэмпирические методы для расчетов синглетного кислорода O2? Почему?

Тема 9. Выполнение и защита практической работы.

творческое задание , примерные вопросы:

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Примерный вариант творческого задания: Согласно экспериментальным данным, химические сдвиги протонов этанола в различных малополярных растворителях расположены области: метильная группа - 1.25 м.д. (CDCl3), 0.96 м.д.(C6D6) метиленовая группа - 3.72 м.д.(CDCl3), 3.34 м.д.(C6D6) химические сдвиги углеродов - в области: метильная группа - 18.41 м.д. (CDCl3), 18.72 м.д. (C6D6) метиленовая группа - 58.28 м.д. (CDCl3), 57.86 м.д. (C6D6) Переберите несколько методов расчетов химических сдвигов - несколько методов DFT и базисных наборов. Одинаково ли хорошо воспроизводятся химические сдвиги углерода и водорода? Как влияет базис на точность расчета химических сдвигов? Проведите расчет с использованием базисного набора, состоящего только из примитивных гауссианов. Насколько точно воспроизводятся характеристики? Предложите способ как можно более точного расчета химических сдвигов.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Вопросы к экзамену и контрольным работам:

1. Основные принципы квантовой механики.
2. Эрмитовы операторы, их собственные векторы и собственные значения.
3. Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии; сигма- и пи- орбитали.
4. Уравнение Шредингера: временное и стационарное.
5. Водородоподобные орбитали, графическое представление их радиальных и угло-вых частей.
6. Приближения, используемые при решении уравнения Шредингера.
7. Одноэлектронное приближение. Принцип тождественности частиц и принцип Паули. Определитель Слейтера.
8. Метод Хартри-Фока. Фокиан, кулоновские и обменные операторы.
9. Приближение МО ЛКАО.
10. Понятие базисного набора; орбитали Слейтеровского и Гауссового типа. Молеку-лярные интегралы.
11. Способы учета электронной корреляции. Конфигурационное взаимодействие.
12. Общие положения теории возмущений. Теория возмущений Меллера-Плессе.
13. Теория функционала плотности (DFT).
14. Континуальные модели описания среды. Реактивное поле Онзагера.
15. Модель поляризуемого континуума.
16. Теория "Атомы в молекулах".
17. Понятие молекулярного графа.
18. Общие представления о полуэмпирических методах квантовой химии.
19. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (CNDO).
20. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием: методы MNDO, AM1, PM3.
21. Выбор адекватного расчетного приближения для расчеты физических характери-стик.
22. Расчеты магнитно-резонансных параметров.
23. Расчеты дипольных моментов и молекулярных поляризуемостей разных порядков.
24. Анализ заселенностей; расчет зарядов на атомах и порядков связей связей.
25. Моделирование химических реакций.
26. Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

7.1. Основная литература:

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 522 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/66357

2. Каплан И.Г., Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 397 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/66358

3. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 383 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/50535

4. Кочелаев, Б.И. Квантовая теория : конспект лекций / Б. И. Кочелаев ; Казанский федеральный университет, Ин-т физики, Каф. теорет. физики. - 2-е изд. - Казань: Казанский университет, 2013. - 222 с.

5. Хемоинформатика и молекулярное моделирование: дистанционный курс для студентов бакалавриата и магистратуры направления подготовки: 020100 'Химия' [Электронный образовательный ресурс]/Химический институт им. А.М. Бутлерова, кафедра органической химии/ Маджидов Т.И. - Казань: Казанский федеральный университет, 2013. -URL: http://zilant.kpfu.ru/course/view.php?id=376

7.2. Дополнительная литература:

1. Шпольский, Э.В. Атомная физика. Том 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома: учебник [Электронный ресурс] / Э.В. Шпольский. - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2010. - 442 с. - URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=443

2. Маджидов, Т.И. Введение в хемоинформатику: учеб. пособие. Ч.1. Компьютерное представление химических структур / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Антипин, А.А. Варнек. - Казань: Казан. ун-т, 2013. - 174 с.

3. Маджидов, Т.И. Введение в хемоинформатику: учеб. пособие. Ч. 2. Химические базы данных / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, А.А. Варнек. - Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2015. - 188 с.

4. Баскин, И.И. Введение в хемоинформатику: учеб. пособие. Ч. 3. Моделирование "структура-свойство" / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. - Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2015. - 304 с.

5. Ибрагимов, И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие [Электронный ресурс] / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2010. - 377 с. - URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=156

7.3. Интернет-ресурсы:

База данных Spectral Database for Organic Compounds (SDBS) - http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs

База данных NIST Chemistry WebBook - http://webbook.nist.gov/chemistry

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

База данных результатов квантовхимических расчетов Computed Property Data Base for Molecules (CPDB) - http://riodb.ibase.aist.go.jp/cpdb/index_e.html

База данных химических сдвигов NmrShiftDB2 - http://nmrshiftdb.nmr.uni-koeln.de

Программа Firefly - http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html

Электронный образовательный ресурс ?Хемоинформатика и молекулярное моделирование? площадки - http://zilant.kfu-elearning.ru/course/view.php?id=376

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Основы квантовой химии" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB,audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудованием имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

слайды с применением мультимедийной техники

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе Хемоинформатика и молекулярное моделирование .

Автор(ы):
Маджидов Т.И. _____
"__" _____ 201 __ г.

Рецензент(ы):
Антипин И.С. _____
"__" _____ 201 __ г.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ