

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. Талюцкий Д.А.



\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

*подписано электронно-цифровой подписью*

### Программа дисциплины

Электронная и пространственная структура молекул Б1.В.ДВ.4

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Чмутова Г.А.

**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 7120717

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

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Чмутова Г.А. Кафедра органической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Galina.Tschmutowa@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины "Электронная и пространственная структура молекул" является овладение современными методами изучения и анализа пространственного и электронного распределения в молекулах и других химических частицах, необходимое для прогнозирования и оценки физических свойств и реакционной способности соединений, подготовка к научно-исследовательской и педагогической деятельности, связанной с пониманием современных представлений о строении вещества.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.4 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Дисциплина "Электронная и пространственная структура молекул" изучается на первом курсе обучающимися по направлению 020100 "Химия", профилю "Хемоинформатика и молекулярное моделирование". Форма обучения - очная. Дисциплина относится к циклу М.2 профессиональных дисциплин, его вариативной части М1.ДВ.1 и является дисциплиной по выбору учащихся.

Дисциплина "Электронная и пространственная структура молекул" занимает важное место в основной образовательной программе магистрантов Химического института им. А.М.Бутлерова по профилю "Хемоинформатика и молекулярное моделирование", и осуществляет межпредметные связи с научными дисциплинами "Неорганическая химия", "Квантовая химия", "Физика", "Физическая химия", "Органическая химия", "Строение вещества"

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-6 (общекультурные компетенции)	понимание принципов и умение работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований
ПК-1 (профессиональные компетенции)	Наличием представлений о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии
ПК-3 (профессиональные компетенции)	Владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии
ПК-4 (профессиональные компетенции)	Умением анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой научным руководителем теме и самостоятельно составлять план исследования
ПК-7 (профессиональные компетенции)	Умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций
ПК-6 (профессиональные компетенции)	Наличие опыта участия в научных дискуссиях

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основные теории, методы и подходы для качественных предсказаний электронного и пространственного строения органических, неорганических, металлоорганических и элементарорганических соединений,
- принципы работы методов изучения пространственной и электронной структуры соединений,
- основы квантовой теории атомов в молекуле Р. Бейдера,

2. должен уметь:

- ориентироваться в экспериментальных и теоретических методах исследования электронной структуры,
- приобретать, систематизировать и обобщать необходимую информацию из интернет-источников, периодической литературы, монографий,
- применять полученные знания на практике, использовать основные законы строения вещества для обоснованного выбора метода исследования, подбора партнеров для реакции, растворителя, катализатора, квалифицированно оценивать результаты эксперимента,
- проводить простейшие квантово-химические расчеты электронной структуры

3. должен владеть:

- теоретическими знаниями о важнейших аспектах электронной структуры (эффективные заряды на атомах, дипольные моменты, поляризуемости, электростатический потенциал, характеристики молекулярных орбиталей, топологические индексы и т.п.)

4. должен продемонстрировать способность и готовность:

реализовать знания об электронной и пространственной структуре молекул для решения практических задач.

#### **4. Структура и содержание дисциплины/ модуля**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 1 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. Строение молекул (химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура).	1	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Строение неорганических молекул. Типы связей в них и их природа.	1	2,3	4	0	0	
3.	Тема 3. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.	1	4,5	2	2	0	Тестирование
4.	Тема 4. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО)	1	6,7	2	2	0	Устный опрос
5.	Тема 5. Теория атомов в молекулах Бейдера	1	8-10	4	2	0	Устный опрос
6.	Тема 6. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.	1	11,12	2	2	0	Дискуссия
7.	Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия	1	13,14	2	2	0	Тестирование
	Тема . Итоговая форма контроля	1		0	0	0	Зачет
	Итого			18	10	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

**Тема 1. Строение молекул (химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура).**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Строение молекул (химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура). Историческое развитие представлений об электронной структуре органических молекул, современное состояние, достижения и проблемы. Экспериментальные и теоретические методы изучения электронной структуры

**Тема 2. Строение неорганических молекул. Типы связей в них и их природа.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Строение неорганических молекул. Типы связей в них и их природа. Координационная связь. Основные концепции для качественного предсказания структуры неорганических соединений. Концепция отталкивания валентных электронных пар и ее теоретические основы. Строение кристаллов. Методы предсказания структуры кристаллов.

**Тема 3. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания. Классические (двухэлектронные двухцентровые) и многоцентровые (орбитальные) связи. Характерные особенности разных типов химической связи.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: "Зарядовое" распределение как результат взаимного влияния атомов, представления об эффективных зарядах на атомах, электронной и спиновой плотности, дипольный момент и поляризуемость молекулы в целом, ее фрагментов и отдельных связей, электростатический потенциал.

**Тема 4. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО)**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО). Канонические, локализованные, натуральные орбитали. Молекулярно-орбитальный генезис.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: Характеристики граничных МО важнейших классов органических соединений.

**Тема 5. Теория атомов в молекулах Бейдера**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Теория атомов в молекулах Бейдера. Топологические характеристики электронного распределения (электронная плотность, градиент электронной плотности, лапласиан, концентрация зарядов в валентной оболочке и т.п.).

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: Визуализация топологических характеристик. Прогнозы с их помощью реакционной способности органических соединений.

**Тема 6. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры. Строение полиэдрических и каркасных структур (бораны и карбораны, металлоорганические комплексы, биокомплексы, кластеры). Принципы изоэлектронности и изолобальности. Правила электронного счета. Диаграммы Уолша.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: Стереопределяющая роль граничных молекулярных орбиталей. Строение "неклассических" структур и интермедиатов.

**Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Межмолекулярные взаимодействия Универсальные (ориентационные, индукционные, дисперсионные) и специфические (комплексы с водородной связью (Н-комплексы), с переносом заряда (КПЗ) и т.п.) межмолекулярные взаимодействия (ММВ), их природа и интенсивность. Влияние ММВ на физические свойства молекул: т. кип., т. пл., растворимость (специфическая и неспецифическая сольватация), адсорбцию, спектральные и другие характеристики; форму больших и малых молекул; тип кристаллической решетки (ионные, атомные, молекулярные кристаллы); химическую и физиологическую активность.

### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: Экспериментальные и теоретические методы исследования межмолекулярного взаимодействия. Модели сольватации.

### **4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

<b>N</b>	<b>Раздел Дисциплины</b>	<b>Семестр</b>	<b>Неделя семестра</b>	<b>Виды самостоятельной работы студентов</b>	<b>Трудоемкость (в часах)</b>	<b>Формы контроля самостоятельной работы</b>
3.	Тема 3. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.	1	4,5	подготовка к тестированию	12	тестирование
4.	Тема 4. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО)	1	6,7	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
5.	Тема 5. Теория атомов в молекулах Бейдера	1	8-10	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
6.	Тема 6. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.	1	11,12		12	дискуссия
7.	Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия	1	13,14	подготовка к тестированию	12	тестирование
	Итого				44	

### **5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения**

Преподавание дисциплины сопровождается:

- демонстрацией слайдов с применением мультимедийной техники,
- интерактивным опросом по разделу 3,
- интерактивный опрос по разделам 5-6,
- круглым столом по теме: "QSAR"
- использованием интернет-ресурсов различных поисковых систем

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

**Тема 1. Строение молекул (химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура).**

**Тема 2. Строение неорганических молекул. Типы связей в них и их природа.**

### **Тема 3. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.**

тестирование , примерные вопросы:

Тестирование по разделам 1-3: 1. Первичная структура, пространственное строение, электронная структура молекул. 2. Экспериментальные и теоретические методы изучения электронной структуры. 3. Строение неорганических молекул, типы связей в них и их природа. Координационная связь. 4. Основные концепции для качественного предсказания структуры неорганических соединений. 5. Концепция отталкивания валентных электронных пар и ее теоретические основы. 6. Классификация и способы описания химических связей в органических соединениях. 7. Классические (двухэлектронные двухцентровые) и многоцентровые (орбитальные) связи. 8. Характерные особенности разных типов химической связи.

### **Тема 4. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО)**

устный опрос , примерные вопросы:

Устный опрос понимания студентами материала по характеристикам молекулярных орбиталей (МО). Темы: - Энергии МО и их роль в оценке реакционной способности химических соединений - Симметрии МО и их использование для оценки возможности протекания химических реакций - Состав молекулярных орбиталей как качественная характеристика, используемая для оценки предпочтительных центров химических реакций

### **Тема 5. Теория атомов в молекулах Бейдера**

устный опрос , примерные вопросы:

Устный опрос для оценки понимания различных аспектов теории "Атомы в молекулах" Р. Бейдера. Темы: Топологический анализ электронной плотности, Интегральные характеристики атомов, Критерии образования водородной связи.

### **Тема 6. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.**

дискуссия , примерные вопросы:

Круглый стол на тему "Моделирование связи структуры со свойствами техниками QSAR"

### **Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия**

тестирование , примерные вопросы:

Тестирование по разделам 4-7: 1. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО). 2. Канонические, локализованные, натуральные орбитали. 3. Молекулярно-орбитальный генезис. 4. Теория атомов в молекулах Бейдера. 5. Топологические характеристики электронного распределения (электронная плотность, градиент электронной плотности, лапласиан, концентрация зарядов в валентной оболочке). 6. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры. 7. Строение полиэдрических и каркасных структур (бораны и карбораны, металлоорганические комплексы, биокомплексы, кластеры). 8. Принципы изоэлектронности и изолюбальности. 9. Правила электронного счета. Диаграммы Уолша. 10. Межмолекулярные взаимодействия - универсальные (ориентационные, индукционные, дисперсионные) и специфические (комплексы с водородной связью (Н-комплексы), с переносом заряда (КПЗ) и т.п.) межмолекулярные взаимодействия (ММВ), их природа и интенсивность. 11. Влияние ММВ на физические свойства молекул: т. кип., т. пл., растворимость (специфическая и неспецифическая сольватация), адсорбцию, спектральные и другие характеристики; форму больших и малых молекул; тип кристаллической решетки (ионные, атомные, молекулярные кристаллы); химическую и физиологическую активность.

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Семинарские занятия включают выполнение квантовохимических расчетов в программах Firefly и Gamess, а также обсуждение и презентацию материалов.

Самостоятельная работа включает следующие виды деятельности:

- изучение теоретического материала, подготовка к интерактивному опросу по материалам лекций;
- проработку теоретического материала;
- подготовка к зачету;
- поиск информации с использованием интернет-ресурсов, знакомство с новыми публикациями по теме собственных научных исследований.

## ТЕСТИРОВАНИЕ ПО РАЗДЕЛАМ 1-3

### ТЕСТОВЫЙ БИЛЕТ

1. Укажите, являются ли приведенные ниже пары соединений энантиомерами или диастереомерами:

- а) (+) и (-) винные кислоты
- б) (-) винная и мезовинная кислоты
- в) цис- и транс-1,2-дихлорэтилены  $C_1CH = CHC_1$
- г) (+)- и (-)-цис-3-метилциклогексанола
- д) цис - и транс- 3-метилциклогексанола
- е) кристаллическая (-) винная кислота и кристаллическая рацемическая винная кислота.

2. Отличаются ли диастереомеры по:

- а) температуре кипения
- б) температуре плавления
- в) ИК-спектрам
- г) ЯМР-спектрам
- д) УФ-спектрам
- е) оптическому вращению
- ж) дисперсии оптического вращения
- з) показателю преломления
- и) дипольным моментам
- к) реакционной способности по отношению к таким хиральным химическим реагентам, как ферменты

Ответ проиллюстрируйте конкретными примерами.

3. Возможно ли для соединений с одинаковым строением:

- а) существование одних только энантиомеров, но не диастереомеров,
- б) существование только диастереомеров, но не энантиомеров
- в) существование как энантиомеров, так и диастереомеров

Приведите примеры.

4. В литературе часто употребляется термин цис- транс- изомерия (или геометрическая изомерия). Соответствует ли этот термин понятию энантиомерии или диастереомерии?

Ответ проиллюстрируйте примерами с указанием свойств соединений.

5. Можно ли говорить о рацемической молекуле? Объясните, что такое рацемическая смесь на основе какого-либо примера.

6. Сколько стереоизомеров, т.е. d,l-пар (половина от числа энантиомеров), мезо или неактивных изомеров, возможно для следующих соединений:

- а) эфедрин  $C_6H_5-CHON-CH(NHCH_3)-CH_3$
- б) альдопентоза  $CH_2OH-CHON-CHON-CHON-CHO$
- в) гидробензоин  $C_6H_5CHONCHONC_6H_5$
- г)  $CH_3CHC_1CHC_1CHC_1CH_3$

д) 4-метилциклогексанол

7. Приведите проекционные формулы Фишера для следующих соединений:

а) R-молочная кислота (2-оксипропионовая кислота)

б) S - аланин (2-аминопропионовая кислота)

в) R- метилфенилкарбинол

г) S - этанол-1-d

д) R- C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CHONC<sub>6</sub>H<sub>5</sub>

е) R,R - винная кислота

ж) S-3-метилпентен-1

з) R,R - циклогександиол -1,3

ТЕСТИРОВАНИЕ ПО РАЗДЕЛАМ 4-7

ТЕСТОВЫЙ БИЛЕТ

1. Дайте определения терминам "строение" и "конфигурация". Чем отличаются приводимые ниже соединения - строением или конфигурацией:

а) молочная кислота CH<sub>3</sub>CH(OH)COOH (вращение не указано) и β-оксипропионовая кислота HOCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>COOH

б) (+) и (-)-молочные кислоты

в) (-)-молочная и β-оксипропионовая кислоты

г) 3- и 4-метилциклогексанолы

д) цис- и транс-3-метилциклогексанолы

е) (+) и (-)-цис-3-метилциклогексанолы

ж) 1-хлорпропен C<sub>1</sub>CH = CH-CH<sub>3</sub>, 2-хлорпропен CH<sub>2</sub> = CC<sub>1</sub>CH<sub>3</sub>

2. Что такое стереоизомеры? Имеют ли они различное строение или нет?

Проиллюстрируйте ответ конкретными примерами.

3. Возможна ли цис- транс- изомерия для следующих соединений:

а) C<sub>1</sub>CH = CHC<sub>1</sub> д) (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C = CH-CH<sub>3</sub>

б) HOOC-CH = CH-COOH е) CHC<sub>1</sub> = C = CHC<sub>1</sub>

в) ангидрид кислоты "б" ж) CH<sub>3</sub>CH = C = C = CH-CH<sub>3</sub>

г) CH<sub>3</sub>CH = CHC<sub>1</sub> з) CH<sub>3</sub> = C = C = CH<sub>2</sub>

4. В изображенных структурах подчеркните одной чертой гомотопные

(эквивалентные), двумя - энантиотопные, тремя - диастереотопные атомы водорода:

а) HOOC-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-COOH б) HOOC-CH<sub>2</sub>-COOH

в) HOOC-CH<sub>2</sub>-CH(CH<sub>3</sub>)-COOH г) CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>COOH

д) C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>-CH<sub>2</sub>-CHON- CH<sub>3</sub> е) HOOC-CH<sub>2</sub>-COOCH<sub>3</sub>

5. Укажите, являются ли стороны двойной связи (C=O или C=C) в приведенных ниже соединениях эквивалентными ("гомотопными"), энантиотопными или диастереотопными:

а) C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH=O б) CH<sub>3</sub>COCH<sub>3</sub> в) CH<sub>3</sub>COCH(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>

г) CH<sub>3</sub>C(O)CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>C(O)CH<sub>3</sub> д) малеиновая кислота е) фумаровая кислота.

6. Охарактеризуйте наиболее важные орбитальные характеристики алкил- и арилкатионов, их геометрию, электрофильную активность.

Вопросы к зачету:

1. Химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура.

2. Историческое развитие представлений об электронной структуре органических молекул, современное состояние, достижения и проблемы.

3. Типы связей в неорганических соединениях и их природа. Координационная связь. Основные концепция для качественного предсказания структуры неорганических соединений. Концепция отталкивания валентных электронных пар и ее теоретические основы.
4. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания. Классические (двухэлектронные двухцентровые) и многоцентровые (орбитальные) связи. Характерные особенности разных типов химической связи.
5. "Зарядовое" распределение, электронная и спиновая плотности, дипольный момент и поляризуемость молекулы в целом, ее фрагментов и отдельных связей, электростатический потенциал.
6. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО).
7. Теория атомов в молекулах Бейдера. Топологические характеристики электронного распределения (электронная плотность, градиент электронной плотности, лапласиан, концентрация зарядов в валентной оболочке и т.п.).
8. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.
9. Строение полиэдрических и каркасных структур (бораны и карбораны, металлоорганические комплексы, биокомплексы, кластеры).
10. Принципы изоэлектронности и изолобальности. Правила электронного счета. Диаграммы Уолша. Строение "неклассических" структур и интермедиатов.
11. Межмолекулярные взаимодействия. Универсальные и специфические межмолекулярные взаимодействия, их природа.
12. Влияние ММВ на физические свойства молекул.
13. Экспериментальные и теоретические методы исследования ММВ. Модели сольватации.

### 7.1. Основная литература:

1. Эволюция теории химического строения вещества А.М. Бутлерова в унитарную теорию строен. химич. соед. (осн. един. химии): Монография / О.С. Сироткин. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2013 - 247с. - URL: <http://znanium.com/bookread.php?book=420415>
2. Ищенко, А.А. Дифракция электронов: структура и динамика свободных молекул и конденсированного состояния вещества. [Электронный ресурс] / А.А. Ищенко, Г.В. Гиричев, Ю.И. Тарасов. - Электрон. дан. - М. : Физматлит, 2013. - 612 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/48303>
3. Природа и механизмы связывания атомов: Монография / А.А. Потапов. - М.: ИЦ РИОР: НИЦ ИНФРА-М, 2013. - 299 с. - URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=411516>
4. Реутов, О.А. Органическая химия. В 4 частях. Часть 2. [Электронный ресурс] / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 626 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66362>

### 7.2. Дополнительная литература:

1. Чмутова, Г.А. Учебно-методическое пособие по курсу 'Строение вещества' / Г. А. Чмутова, А. Р. Курбангалиева, М. А. Казымова; Казан. гос. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова. - Казань: Казанский государственный университет, 2009.- 35 с.

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. Травень, В.Ф. Органическая химия : учебное пособие для вузов : в 3 т. Т. 1. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. - 401 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/84108>
4. Травень, В.Ф. Органическая химия : учебное пособие для вузов : в 3 ч. Т. 2. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. - 550 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/84109>
5. Чмутова, Г.А. Аспекты связи 'Строение - реакционная способность': учебное пособие / Г. А. Чмутова; Казан. (Приволж.) федер. ун-т, Хим. ин-т. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2010. - 93 с.

### 7.3. Интернет-ресурсы:

Basis Set Exchange: A Community Database for Computational Sciences - <https://bse.pnl.gov/bse/portal>

Поисковая система Scencedirect - <http://www.sciencedirect.com/>

Прграмма GAMESS и материалы сайта - <http://www.msg.ameslab.gov/games/>

Программа AIMAll - <http://aim.tkgristmill.com>

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

### 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Электронная и пространственная структура молекул" 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 оборудование 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 "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

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.

Компьютерный класс с программным обеспечением. Используемое программное обеспечение является бесплатным или у КФУ имеется лицензия на использование.

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):

Чмутова Г.А. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.