

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Д.А. Таюрский

ДЕПАРТАМЕНТ
ОБРАЗОВАНИЯ
(ДО КФУ)

» _____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Молекулярное моделирование

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия супрамолекулярных нано- и биосистем

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

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

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-3	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3).
ОПК-1	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);
ОПК-2	владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации (ОПК-2);
ПК-2	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основные понятия, определения, методы и подходы, используемые в молекулярном моделировании силовыми полями;
- представления, лежащие в основе моделирования молекулярной динамики;
- возможности компьютерной реализации молекулярного моделирования и типичные задачи, решаемые с его помощью;
- функциональный вид и природу потенциалов молекулярного взаимодействия;
- вид уравнений движения, способы учета влияния внешней среды и наличие различных граничных условий;
- базовые алгоритмы для численного интегрирования уравнений движения молекулярной системы;
- место и роль молекулярного моделирования в химии и биологии.

Должен уметь:

- формулировать модельное представление молекулярного объекта и возможности организации вычислительных молекулярно-динамических экспериментов с ним;
- проводить расчеты для модельных молекулярных систем с использованием различных программных средств;
- проводить обработку результатов молекулярно-динамических расчетов.

Должен владеть:

методами и основными программными средствами для проведения молекулярного моделирования методами силовых полей.

Должен демонстрировать способность и готовность:

самостоятельно ставить и решать задачи, связанные с моделированием сложных систем.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.2 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Химия супрамолекулярных нано- и биосистем)" и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 2 курсе в 3 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

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

Контактная работа - 28 часа(ов), в том числе лекции - 10 часа(ов), практические занятия - 18 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 44 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 3 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение в дисциплину.	3	2	0	0	
2.	Тема 2. Силовые поля.	3	2	2	0	6
3.	Тема 3. Минимизация потенциальной энергии.	3	2	2	0	6
4.	Тема 4. Основы статистической термодинамики.	3	2	2	0	
5.	Тема 5. Молекулярная динамика.	3	2	2	0	4
6.	Тема 6. Особые условия в молекулярном моделировании.	3	2	4	0	16
7.	Тема 7. Применение молекулярного моделирования.	3	2	2	0	12
	Итого		14	14	0	44

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Введение в дисциплину.

Введение в дисциплину. Предмет курса. Основные понятия молекулярного моделирования. Единицы измерения в "молекулярном мире". Характерные единицы массы, энергии, времени. О числе частиц в моделируемой молекулярной системе. Этапы развития молекулярного моделирования. Области применения молекулярного моделирования.

Тема 2. Силовые поля.

Основные представления о силовых полях. Силовое поле AMBER. Функциональный вид взаимодействий. Невалентные взаимодействия: ван-дер-ваальсовы и кулоновские силы. Выбор атомных зарядов. Основы работы с пакетами программ моделирования методами молекулярной механики.

Тема 3. Минимизация потенциальной энергии.

Понятие о поверхности потенциальной энергии. Минимум, переходное состояние и интермедиат. Гесссиант и его использование для характеристики точек. Глобальная и локальная минимизация геометрии. Алгоритмы локальной минимизации. Понятие о порядке минимизатора. Минимизаторы нулевого, первого и второго порядка. Метод симплексов и биекций. Метод следования градиенту, метод сопряженных градиентов. Метод Ньютона и Ньютона-Рафсона. Алгоритмы глобальной минимизации геометрии. Оптимизация геометрии молекулы.

Тема 4. Основы статистической термодинамики.

Основные положения статистической термодинамики, их применение в молекулярном моделировании. Метод конформационного анализа Монте-Карло. Броуновская динамика. Оптимизация геометрии молекулы методом Монте-Карло.

Тема 5. Молекулярная динамика.

Динамика молекулярных систем. Уравнения движения: Ньютона, Лагранжа, Гамильтона. Молекулярная динамика. Численное интегрирование уравнений движения. Алгоритм Верле (простейшая разностная аппроксимация). Алгоритм с перескоками (leap-frog алгоритм). Скоростной алгоритм Верле. Проведение моделирования методом молекулярной динамики.

Тема 6. Особые условия в молекулярном моделировании.

Ограничения, налагаемые на расчеты молекулярного моделирования для уменьшения сложности системы, а также для учета особых свойств системы: растворитель, протяженность, термодинамические характеристики. Представление растворителя.

Граничные условия. Обрезка потенциала.

Контрольная работа (2ч.): решение задач.

Семинарское занятие на тему Особые условия в молекулярном моделировании (2ч.). Защита научных докладов.

Тема 7. Применение молекулярного моделирования.

Применение молекулярного моделирования к моделированию биологических макромолекул, наноструктур, молекул в растворе. Использование молекулярного моделирования в генерировании структуры белков.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Taking A Closer Look at Molecular Modeling - <http://www.medicalbillingandcoding.org/what-is-mbac/>

База данных Protein Data Bank - <http://www.rcsb.org>

Программа NAMD - <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

Программа Tinker - <http://dasher.wustl.edu/tinker/>

Программа VEGA ZZ - <http://www.vegazz.net/>

Программа VMD для визуализации - <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

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

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Методические указания к самостоятельной работе студентов:

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- подготовку к практическим занятиям, устным опросам и контрольной работе;
- работу с Интернет-источниками;
- подготовку к сдаче практических работ, защите доклада и творческого задания, сдаче зачета.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины 'Молекулярное моделирование'. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины, следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.

Методические указания к выполнению письменных домашних заданий:

Выполнение письменного домашнего задания подразумевает решение задач (в случае письменного домашнего задания ♦1) либо выполнение расчетов с использованием программы VegaZZ, с последующим написанием отчета (письменное домашнее задание ♦2). Письменное домашнее задание следует выполнять полностью, не пропуская ни одного пункта задания. При выполнении данных письменных домашних заданий могут возникнуть вопросы, поэтому не следует оставлять их на последний день, чтобы иметь возможность обратиться за помощью к преподавателю. Решение задач, как и ответы на вопросы, следует излагать точно, ясно и полно, с сохранением всего хода рассуждений. Письменные домашние задания должны быть оформлены аккуратно, без грамматических ошибок либо помарок.

Методические указания к дискуссии:

Дискуссия - метод активного включения обучаемых в коллективный поиск истины, повышающий интенсивность и эффективность учебного процесса. Она требует от студентов напряженной самостоятельной работы, рождает у каждого из них потребность высказать собственную точку зрения, свое мнение по обсуждаемому вопросу. Дискуссия должна быть доброжелательной и корректной. Ее участники должны проявлять принципиальность и последовательность в суждениях, ответственность за свое выступление, что выражается в научной весомости замечаний и контраргументов, содержательности выражаемой мысли, точности в определении понятий.

Методические указания к научному докладу:

Работа студента над докладом-презентацией включает отработку навыков ораторства и умения организовать и проводить диспут. Студент в ходе работы по презентации доклада, отрабатывает умение ориентироваться в материале и отвечать на дополнительные вопросы слушателей; самостоятельно обобщить материал и сделать выводы в заключении.

Докладчик должен знать и уметь очень многое:

- сообщать новую информацию;

- использовать технические средства;
- знать и хорошо ориентироваться в теме всей презентации;
- уметь дискутировать и быстро отвечать на вопросы;
- четко выполнять установленный регламент: докладчик - 10 мин.; дискуссия - 10 мин;
- иметь представление о композиционной структуре доклада.

Необходимо помнить, что выступление состоит из трех частей: вступление, основная часть и заключение. Вступление помогает обеспечить успех выступления по любой тематике. Вступление должно содержать:

- название презентации (доклада);
- сообщение основной идеи;
- современную оценку предмета изложения;
- краткое перечисление рассматриваемых вопросов;
- живую интересную форму изложения;
- акцентирование оригинальности подхода.

Основная часть, в которой выступающий должен глубоко раскрыть суть затронутой темы, обычно строится по принципу отчета. Задача основной части - представить достаточно данных для того, чтобы слушатели и заинтересовались темой и захотели ознакомиться с материалами. При этом логическая структура теоретического блока не должны даваться без наглядных пособий, аудио-визуальных и визуальных материалов. Заключение - это ясное четкое обобщение и краткие выводы, которых всегда ждут слушатели.

Методические указания к выполнению контрольной работы:

К выполнению контрольных работ рекомендуется приступать только после усвоения всего необходимого учебного материала дисциплины.

Рекомендации по освоению контрольных работ:

- контрольную работу следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю;
- ответы в контрольных работах излагать ясно, точно и полно, таким образом, чтобы преподавателю был ясен весь ход рассуждений;
- при выполнении расчётов необходимо внимательно относиться к единицам измерения всех величин, входящих в ту или иную формулу, и проверять, в каких единицах измерения должен быть результат;
- контрольная работа выполняется на листах формата А4;
- не допускаются перечёркивания, вставки, произвольное сокращение слов и каких-либо обозначений, не применяемых в литературе по изучаемой дисциплине;
- неудовлетворительное оформление контрольной работы может быть причиной её незачёта; небрежность письма и грамматические ошибки недопустимы;
- на каждой странице работы необходимо оставлять поля;
- в шапке контрольной работы необходимо написать фамилию, инициалы, группу, направление, курс, наименование дисциплины, номер контрольного задания.

Методические указания к творческому заданию:

Творческое задание представляет собой самостоятельное проведение моделирования с использованием методов силовых полей. По результатам творческого задания студент сдает письменный отчет, включающий цели, задачи, протокол расчетов, анализ результатов, ответы на вопросы из творческого задания.

Методические указания по подготовке к зачету:

Подготовка к зачету способствует закреплению, углублению и обобщению знаний, получаемых, в процессе обучения, а также применению их к решению практических задач. Готовясь к зачету, студент ликвидирует имеющиеся пробелы в знаниях, углубляет, систематизирует и упорядочивает свои знания. На зачете студент демонстрирует то, что он приобрел в процессе обучения по конкретной учебной дисциплине. При подготовке к зачету необходимо ознакомиться списком вопросов к зачету, повторно ознакомиться с лекционным материалом, систематизировать информацию по курсу. Особое внимание следует уделить разделам курса, изученным самостоятельно и вызывавшим наибольшее затруднение при теоретическом изучении и решении практических задач.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Химия супрамолекулярных нано- и биосистем".

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия супрамолекулярных нано- и биосистем

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Основная литература:

1. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек .- Казань : [Казанский университет], 2013 . [Ч. 1]: Компьютерное представление химических структур .- 2013 .- 173 с.
2. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек .- Казань : [Казанский университет], 2013 . Ч. 2: Химические базы данных / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т .- Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 .- 185 с.
3. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек .- Казань : [Казанский университет], 2013 . Ч. 3: Моделирование 'структура-свойство' / И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т .? Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 .- 302 с.
4. Уилсон, К. Принципы и методы биохимии и молекулярной биологии. [Электронный ресурс] / К. Уилсон, Д. Уолкер. - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. - 855 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66244>
5. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов [Электронный ресурс] : учеб. пособие -Электрон. дан. -Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. -522 с. -Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>. -Загл. с экрана.

Дополнительная литература:

1. Ибрагимов, И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем. [Электронный ресурс] / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2010. - 384 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/156>
2. Аминова, Роза Мухаметовна. Поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Квантовохимические методы анализа ППЭ : учебное пособие / Р. М. Аминова .- Казань : Казанский государственный университет, 2009 .- 124 с.
3. Ансельм, А.И. Основы статистической физики и термодинамики. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2007. - 448 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/692>
4. Кашурников, В.А. Численные методы квантовой статистики. [Электронный ресурс] / В.А. Кашурников, А.В. Красавин. - Электрон. дан. - М. : Физматлит, 2010. - 628 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/2197>
5. Зисман, Г.А. Курс общей физики. В 3-х тт. Т.1. Механика. Молекулярная физика. Колебания и волны. [Электронный ресурс] / Г.А. Зисман, О.М. Тодес. - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2007. - 352 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/505>
6. Юрчук, С.Ю. Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур. Моделирование наносистем методами молекулярной динамики. Курс лекций. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : МИСИС, 2013. - 47 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/47471>

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия супрамолекулярных нано- и биосистем

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен обучающимся. 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.