

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. Минзарипов Р.Г.

\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Программа дисциплины**

Современные теории химической связи М2.Б.1.2

Направление подготовки: 020100.68 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Штырлин В.Г.

**Рецензент(ы):**

Амиров Р.Р.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Амиров Р. Р.

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

Казань  
2013

## 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) заведующий лабораторией Штырлин В.Г. лаборатория координационных соединений Отдел неорганической и координационной химии ,  
Valery.Shtyrlyn@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины "Современные теории химической связи" являются усвоение студентами теоретических знаний о природе химической связи, методах расчета пространственной и электронной структуры молекул (в газовой фазе и растворах), а также твердых тел, приобретение умения анализировать результаты расчетов молекул и твердых тел.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М2.Б.1 Профессиональный" основной образовательной программы 020100.68 Химия и относится к базовой (общепрофессиональной) части. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Дисциплина "Современные теории химической связи" относится к базовому блоку дисциплин профессионального цикла ( М2. Б1.2) и опирается на основные разделы общенаучных дисциплин: высшая математика, физика, неорганическая химия.

Требования к "входным" знаниям, умениям и готовностям обучающегося, которые необходимы при освоении дисциплины "Современные теории химической связи".

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-4 (общекультурные компетенции)	понимание философских концепций естествознания, роли естественных наук (химии в том числе) 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 представления о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в экстремальных условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и другие)
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, понимание объективной необходимости возникновения новых направлений, наличие представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основы геометрического и алгебраического подходов к теории симметрии для молекул и твердых тел;
- основы современных методов описания химической связи;
- представления об особенностях различных типов химической связи в газовой фазе и конденсированном состоянии.

2. должен уметь:

- анализировать данные расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях;
- ориентироваться в литературе, касающейся описания различных типов химической связи.

3. должен владеть:

- описания симметрии молекул и твердых тел;
- расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях.
- применять геометрический и алгебраический подходы к теории симметрии для характеристики молекул и твердых тел;
- использовать основы современных методов описания химической связи молекул, супрамолекулярных структур и твердых тел;
- обсуждать особенности различных типов химической связи в газовой фазе и конденсированном состоянии;
- анализировать данные расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях;
- ориентироваться в литературе, касающейся описания различных типов химической связи;
- рассчитывать параметры химической связи веществ в различных агрегатных состояниях.

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

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

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет 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. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход	2	1	2	2	0	устный опрос
2.	Тема 2. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп).	2	2	2	2	0	устный опрос
3.	Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах.	2	3	2	2	0	контрольная работа
4.	Тема 4. Квантовая химия молекул: основные принципы.	2	4	2	2	0	устный опрос
5.	Тема 5. Квантовая химия молекул: расчеты структур методом функционала плотности.	2	5	2	2	0	устный опрос
6.	Тема 6. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах".	2	6	2	2	0	устный опрос
7.	Тема 7. Расчеты структур молекул с учетом эффектов среды.	2	7	2	2	0	устный опрос
8.	Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях.	2	8	2	2	0	устный опрос
9.	Тема 9. Электронная структура твердых тел.	2	9	2	2	0	устный опрос
10.	Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий.	2	10-11	2	4	0	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	зачет
	Итого			20	22	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

##### **Тема 1. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход**

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

Элементы и операции точечной симметрии. Описание симметрии стереохимически нежестких структур. Применение теории симметрии к установлению наличия оптической активности, дипольного момента, эквивалентных атомов, диастереотопии молекул.

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

Решение задач на применение геометрического подхода к теории симметрии к установлению наличия оптической активности, дипольного момента, эквивалентных атомов и диастереотопии молекул.

##### **Тема 2. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп).**

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

Основные свойства математической группы. Таблица умножения для группы. Подгруппы, циклические и абелевы группы. Классы сопряженных элементов. Преобразование подобия для матриц. Представления групп. Неприводимые представления. Редукция приводимых представлений. Неприводимые представления и классификация термов. Термы многоэлектронных состояний. Редукция по симметрии термов многоэлектронных систем. Правила отбора для матричных элементов. Симметрия молекулярных орбиталей.

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

Решение задач на редукцию приводимых представлений.

##### **Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах.**

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

Операции открытой симметрии. Кристаллические системы. Решетки Бравэ. Пространственные группы. Антисимметрия. Магнитные и цветные группы симметрии.

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

Решение задач на определение пространственных групп симметрии и характеристик твердых тел.

##### **Тема 4. Квантовая химия молекул: основные принципы.**

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

Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера. Обменное взаимодействие. Электронная плотность в молекулах. Метод самосогласованного поля. Базисные наборы. Молекулярные интегралы. Электронная корреляция.

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

Решение уравнения Шредингера для частных случаев. Рассмотрение различных базисных наборов.

##### **Тема 5. Квантовая химия молекул: расчеты структур методом функционала плотности.**

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

Функционал энергии. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционные функционалы и результаты их применения к расчетам различных структур молекул.

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

Сопоставительный анализ различных обменно-корреляционных функционалов и их применения к расчетам структур молекул.

**Тема 6. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах".**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Топологический анализ распределения электронной плотности.

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

Анализ различных типов критических точек электронной плотности, полученных в расчетах различных структур

**Тема 7. Расчеты структур молекул с учетом эффектов среды.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Континуальные и дискретные модели учета эффектов растворителя. Результаты применения к расчетам структур молекул моделей диэлектрического континуума и реактивного поля Онзагера, методов самосогласованного реактивного поля (SCRF) и поляризуемого континуума (PCM).

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

Анализ результатов квантово-химических расчетов структур органических и координационных соединений с учетом эффектов среды.

**Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Описание химической связи в теории кристаллического поля, теория поля лигандов и молекулярных орбиталей. Спектрохимический ряд. Комплексы сильного и слабого полей. Магнитные свойства комплексов. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Эффект Яна-Теллера. Спин-кроссовер.

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

Расчеты энергии стабилизации кристаллическим полем для различных комплексов. Анализ проявлений эффекта Яна-Теллера.

**Тема 9. Электронная структура твердых тел.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Одноэлектронные волновые функции в кристаллах и методы их расчета. Приближение локальной плотности. Уровень Ферми. Плотность состояний. Зонная структура твердых тел. Ха-метод. Модель Гудинафа. Модель кластеров. Кооперативные эффекты Яна-Теллера и спиновые переходы в твердых телах.

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

Рассмотрение зонной структуры твердых тел. Анализ кооперативных эффектов Яна-Теллера и спиновых переходов в различных твердых телах.

**Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия. Донорно-акцепторные молекулярные комплексы. Специфические невалентные взаимодействия. Водородная связь. Супрамолекулярные структуры.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Анализ результатов оптимизации структур с Ван-дер-Ваальсовыми взаимодействиями, донорно-акцепторных молекулярных комплексов, водородной связью, супрамолекулярных комплексов. Практические занятия по применению компьютеров для квантово-химических расчетов.

**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
1.	Тема 1. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход	2	1	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
2.	Тема 2. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп).	2	2	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
3.	Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах.	2	3	подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
4.	Тема 4. Квантовая химия молекул: основные принципы.	2	4	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
5.	Тема 5. Квантовая химия молекул: расчеты структур методом функционала плотности.	2	5	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
6.	Тема 6. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах".	2	6	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
7.	Тема 7. Расчеты структур молекул с учетом эффектов среды.	2	7	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
8.	Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях.	2	8	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
9.	Тема 9. Электронная структура твердых тел.	2	9	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
10.	Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий.	2	10-11	подготовка к устному опросу	12	устный опрос
	Итого				66	

## 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Каждая лекция сопровождается демонстрацией иллюстративных материалов с использованием проекционной техники и обязательными записями на доске. Некоторая часть лекционного курса проводится в режиме диалога учитель-ученик. После завершения каждой лекции студенты получают домашние задания и все иллюстрации прошедшей лекции в электронной форме, а также наиболее важные материалы курса в печатном виде. Ввиду ограниченности аудиторных занятий и большого объема самостоятельной работы студентам предоставляется возможность консультироваться с лектором в назначенное внеаудиторное время.

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

### **Тема 1. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход**

устный опрос , примерные вопросы:

Элементы и операции точечной симметрии. Применение теории симметрии к установлению наличия оптической активности, дипольного момента, эквивалентных атомов, диастереотопии молекул.

### **Тема 2. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп).**

устный опрос , примерные вопросы:

Основные свойства математической группы. Таблица умножения для группы. Подгруппы, циклические и абелевы группы. Классы сопряженных элементов. Преобразование подобия для матриц. Представления групп. Неприводимые представления. Редукция приводимых представлений. Правила отбора для матричных элементов. Симметрия молекулярных орбиталей.

### **Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Операции открытой симметрии. Кристаллические системы. Решетки Бравэ. Пространственные группы. Антисимметрия. Магнитные и цветные группы симметрии.

### **Тема 4. Квантовая химия молекул: основные принципы.**

устный опрос , примерные вопросы:

Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера. Обменное взаимодействие. Электронная плотность в молекулах. Метод самосогласованного поля. Базисные наборы. Молекулярные интегралы. Электронная корреляция.

### **Тема 5. Квантовая химия молекул: расчеты структур методом функционала плотности.**

устный опрос , примерные вопросы:

Функционал энергии. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционные функционалы и результаты их применения к расчетам различных структур молекул.

### **Тема 6. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах".**

устный опрос , примерные вопросы:

Топологический анализ распределения электронной плотности.

### **Тема 7. Расчеты структур молекул с учетом эффектов среды.**

устный опрос , примерные вопросы:

Континуальные и дискретные модели учета эффектов растворителя. Результаты применения к расчетам структур молекул моделей диэлектрического континуума и реактивного поля Онзагера, методов самосогласованного реактивного поля (SCRF) и поляризуемого континуума (PCM).

### **Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях.**

устный опрос , примерные вопросы:

Описание химической связи в теории кристаллического поля, теория поля лигандов и молекулярных орбиталей. Спектрохимический ряд. Комплексы сильного и слабого полей. Магнитные свойства комплексов. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Эффект Яна-Теллера. Спин-кроссовер.

### **Тема 9. Электронная структура твердых тел.**

устный опрос , примерные вопросы:

Одноэлектронные волновые функции в кристаллах и методы их расчета. Приближение локальной плотности. Уровень Ферми. Плотность состояний. Зонная структура твердых тел. Х<sub>α</sub>-метод в расчетах структур твердых тел. Модель Гудинафа. Модель кластеров. Кооперативные эффекты Яна-Теллера и спиновые переходы в твердых телах.

### **Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий.**

устный опрос , примерные вопросы:

Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия. Донорно-акцепторные молекулярные комплексы. Специфические невалентные взаимодействия. Водородная связь. Супрамолекулярные структуры.

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

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к зачету и контрольным работам

1. Элементы и операции точечной симметрии.
2. Описание симметрии стереохимически нежестких структур.
3. Применение теории симметрии к установлению наличия оптической активности, дипольного момента, эквивалентных атомов, диастереотопии молекул.
4. Основные свойства математической группы.
5. Таблица умножения для группы. Подгруппы, циклические и абелевы группы.
6. Классы сопряженных элементов. Преобразование подобия для матриц.
7. Представления групп. Неприводимые представления.
8. Редукция приводимых представлений.
9. Неприводимые представления и классификация термов.
10. Термы многоэлектронных состояний. Редукция по симметрии термов многоэлектронных систем.
11. Правила отбора для матричных элементов.
12. Симметрия молекулярных орбиталей.
13. Операции открытой симметрии.
14. Кристаллические системы. Решетки Бравэ.
15. Пространственные группы.
16. Антисимметрия. Магнитные и цветные группы симметрии.
17. Уравнение Шредингера для молекул.
18. Приближение Борна-Оппенгеймера.
19. Обменное взаимодействие.
20. Электронная плотность в молекулах.
21. Метод самосогласованного поля.
22. Базисные наборы. Молекулярные интегралы.
23. Электронная корреляция.
24. Функционал энергии. Уравнения Кона-Шэма.
25. Обменно-корреляционные функционалы.
26. Топологический анализ распределения электронной плотности в теории Бейдера "Атомы в молекулах".

27. Континуальные и дискретные модели учета эффектов растворителя.
28. Расчет структур молекул в моделях диэлектрического континуума и реактивного поля Онзагера.
29. Расчет структур молекул с использованием методов самосогласованного реактивного поля (SCRF) и поляризуемого континуума (PCM).
30. Описание химической связи в координационных соединениях в теории кристаллического поля.
31. Описание химической связи в координационных соединениях в теориях поля лигандов и молекулярных орбиталей.
32. Спектрохимический ряд. Комплексы сильного и слабого полей. Магнитные свойства комплексов.
33. Энергия стабилизации кристаллическим полем.
34. Эффект Яна-Теллера в координационных соединениях.
35. Спин-кроссовер в координационных соединениях.
36. Одноэлектронные волновые функции в кристаллах и методы их расчета. Приближение локальной плотности. Уровень Ферми. Плотность состояний.
37. Зонная структура твердых тел. Ха-метод.
38. Модель Гудинафа для описания твердых тел.
39. Модель кластеров для описания твердых тел.
40. Кооперативные эффекты Яна-Теллера в твердых телах.
41. Спиновые переходы в твердых телах.
42. Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия.
43. Донорно-акцепторные молекулярные комплексы.
44. Водородная связь.
45. Супрамолекулярные структуры.

### **7.1. Основная литература:**

1. В.Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: Учебное пособие. Издательство: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. 495 с.  
[//http://www.knigafund.ru/books/42620](http://www.knigafund.ru/books/42620)

### **7.2. Дополнительная литература:**

1. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. - М.: Мир, 1983. - 400 с.
2. Хохштрассер Р. Молекулярные аспекты симметрии. - М.: Мир, 1968. - 384 с.
3. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986.
4. Артамонов В.А. Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии / В.А. Артамонов, Ю.Л. Словохотов. - М.: ИЦ "Академия", 2005. - 512 с.
5. Н.Ф. Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. - М.: Мир, 2001. - 519 с.
6. Минкин В.И. Теория строения молекул / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. - М.: Высшая школа, 1997. - 407 с.
7. Заградник Р. Основы квантовой химии / Р. Заградник, Р. Полак. - М.: Мир, 1979. - 504 с.
8. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. - М.: Мир, 1983.
9. Бейдер Р. Атомы в молекулах: квантовая теория. - М.: Мир, 2001.
10. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. Т.1-3. - М.: Мир, 1987-1988.
11. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л.: Химия, 1986. - 288 с.
12. Rao C.N.R. New Directions in Solid State Chemistry. Second Edition / C.N.R. Rao, J. Gopala-krishnan. - Cambridge: University Press, 1997. - 549 p.

13. Gillespie R.J. Chemical bonding and Molecular geometry: From Lewis to Electron densities / R.J. Gillespie, P.L.A. Popelier. Oxford University Press, NY, 2001. – 268 p.
14. Цюлике П. Квантовая химия. – М.: Мир, 1976. – 512 с.
15. Эткинс П. Кванты: справочник концепций. – М.: Мир, 1977. – 496 с.
16. Жидомиров Г.И. Прикладная квантовая химия / Г.И. Жидомиров, А.А. Багатурьянц, И.А. Абронин. – М.: Химия, 1979. – 295 с.
17. Цирельсон В.Г. Квантовая химия молекул / В.Г. Цирельсон, М.Ф. Бобров. - М: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2001. – 108 с.

### **7.3. Интернет-ресурсы:**

поисковая система - [www.google.ru](http://www.google.ru)

сайт "Basis set exchange" - <https://bse.pnl.gov/bse/portal>

сайт "Gaussian" - <http://www.gaussian.com/>

сайт "Introduction to the Firefly" - <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/>

сайт "Аминов. Теория симметрии" - <http://www.znaika.org/?q=teorija-simmetrii>

### **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану**

Освоение дисциплины "Современные теории химической связи" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.68 "Химия" и магистерской программе Хемоинформатика и молекулярное моделирование .

Автор(ы):

Штырлин В.Г. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Амиров Р.Р. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

## Лист согласования

<b>N</b>	<b>ФИО</b>	<b>Согласование</b>
1	Амиров Р. Р.	Согласовано
2	Антипин И. С.	
3	Бычкова Т. И.	
4	Чижанова Е. А.	
5	Соколова Е. А.	
6	Тимофеева О. А.	