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
_____ «___»_____20__г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Квантовая химия

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия
Специализация: не предусмотрено
Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2016

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

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

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-7	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-7);
ОПК-1	способностью воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);
ОПК-3	способностью использовать теоретические основы фундаментальных разделов математики и физики в профессиональной деятельности (ОПК-3);
ПК-3	владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания (ПК-3);
ПК-5	способностью приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владение ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций (ПК-5);

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

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

Должен уметь:

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

Должен владеть:

навыками:

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

Должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания на практике для решения теоретических и прикладных задач

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.Б.24 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия (не предусмотрено)" и относится к базовой (общепрофессиональной) части.
Осваивается на 5 курсе в 9 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 3 зачетных(ые) единиц(ы) на 108 часа(ов).

Контактная работа - 46 часа(ов), в том числе лекции - 18 часа(ов), практические занятия - 28 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 62 часа(ов).

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

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 9 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. Тема 1. Квантовая химия. Оптимизация геометрии	9	2	2	0	6
2.	Тема 2. Тема 2. Квантовая механика	9	4	2	0	6
3.	Тема 3. Тема 3. Приближения квантовой химии. Метод Хартри.	9	2	0	0	4
4.	Тема 4. Тема 4. Метод Хартри-Фока	9	2	4	0	6
5.	Тема 5. Тема 5. Базисные наборы и псевдопотенциалы.	9	2	6	0	8
6.	Тема 6. Тема 6. Электронные характеристики	9	2	4	0	4
7.	Тема 7. Тема 7. Полуэмпирические методы квантовой химии	9	2	2	0	6
8.	Тема 8. Тема 8. Методы учета электронной корреляции. Методы теории функционала плотности.	9	2	2	0	6
9.	Тема 9. Тема 9. Выполнение и защита практической работы.	9	0	6	0	16
	Итого		18	28	0	62

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Тема 1. Квантовая химия. Оптимизация геометрии

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.

Тема практического занятия - оптимизация геометрии молекулы.

Тема 2. Тема 2. Квантовая механика

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.

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

Тема 3. Тема 3. Приближения квантовой химии. Метод Хартри.

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

Тема 4. Тема 4. Метод Хартри-Фока

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).

Тема практического занятия - использование метода Хартри-Фока.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Тема 5. Тема 5. Базисные наборы и псевдопотенциалы.

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.

Тема практического занятия - выбор базисного набора для расчетов.

Тема 6. Тема 6. Электронные характеристики

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.

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

Тема 7. Тема 7. Полуэмпирические методы квантовой химии

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.

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

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

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.

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. Тема 9. Выполнение и защита практической работы.

Выполнение и защита практической работы (творческое задание).

Выбор адекватного расчетного приближения. Расчеты магнитно-резонансных параметров. Расчеты электрических характеристик - дипольных моментов и молекулярных поляризуемостей разных порядков.

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)

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

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

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

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

Программа Gaussian - http://www.gaussian.com/index.htm

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)

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	В ходе лекционных занятий вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации, положительный опыт в ораторском искусстве. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций.

Вид работ	Методические рекомендации
практические занятия	По результатам каждого практического занятия должны оформляться отчеты. Отчет должен соответствовать следующим требованиям: 1. Отчет по лабораторной работе должен содержать следующие разделы: a. Дата выполнения лабораторной работы b. Название лабораторной работы c. Цель лабораторной работы d. Задачи лабораторной работы e. Материалы, использовавшиеся для выполнения лабораторной работы (программы, исходные файлы) f. Поэтапное изложение процедуры (этап 1, этап 2) g. Результаты работы (+ таблицы, графики, иллюстрации, если требуются) h. Выводы 2. При написании отчета по лабораторной работе должен быть использован научный стиль речи (https://ru.wikipedia.org/wiki/Научный_стиль). 3. Выводы должны соответствовать заявленным цели и задачам работы, а также полученным результатам. 4. Цель и задачи должны быть сформулированы четко, ясно, лаконично и соответствовать теме (названию) работы. 5. Этапы работы должны быть представлены полностью, сформулированы четко, ясно, лаконично. 6. Результаты должны быть представлены полностью, сформулированы понятно, четко, ясно, лаконично, если необходимо, с использованием иллюстративных материалов (не забываем про нумерацию рисунков и таблиц и подписи к ним!).
самостоя-тельная работа	При самостоятельной работе по подготовке к устному опросу необходимо ознакомиться с темой и списком вопросов по теме. Повторите лекционный материал по теме, отметьте ?проблемные? точки. Определите необходимую литературу из рекомендованной к курсу, можно воспользоваться интернет-источниками. При работе с источниками, учебниками и методическими пособиями, выполняйте общие рекомендации по самостоятельной работе. Сформируйте тезисный список ответов на вопросы, со своими замечаниями и комментариями. Студент должен быть готов ответить на поставленные вопросы, аргументировать свой вариант ответа, ответить на дополнительные и уточняющие вопросы преподавателя. После окончания опроса оценить степень правильности своих ответов, уяснить суть замечаний и комментариев преподавателя.
зачет	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 ознакомится списком вопросов к зачету, повторно ознакомится с лекционным материалом, систематизировать информацию по курсу. Особое внимание следует уделить разделам курса, изученным самостоятельно и вызывавшим наибольшие 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

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

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 специальности: 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации "не предусмотрено".

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.Б.24 Квантовая химия

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия
Специализация: не предусмотрено
Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Основная литература:

1. 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.

2. Каплан И.Г., Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] : учеб. пособие ? Электрон. дан. ? Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. ? 397 с. ? Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94111. ? Загл. с экрана.

3. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учеб. пособие ? Электрон. дан. ? Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. ? 387 с. ? Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94102. ? Загл. с экрана.

4. Кочелаев, Борис Иванович (д-р физ.-мат. наук ; 1934-) . Квантовая теория : конспект лекций / Б. И. Кочелаев ; Казан. федер. ун-т, Ин-т физики, Каф теорет. физики .- [2-е изд., перераб., доп. и испр.] .- 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

Дополнительная литература:

1. Шпольский, Э.В. Атомная физика. Том 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2010. - 448 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/443

2. 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.

3. 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.

4. 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.

5. 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

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.Б.24 Квантовая химия

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

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия
Специализация: не предусмотрено
Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2016

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.