

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт фундаментальной медицины и биологии



**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор  
по образовательной деятельности КФУ  
Проф. Минзарипов Р.Г.

"\_\_" \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Программа дисциплины**  
Основы квантовой химии М1.В.1.1

Направление подготовки: 020400.68 - Биология

Профиль подготовки: Биоинформатика

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Акберова Н.И.

**Рецензент(ы):**

Тарасов Д.С.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой:

Протокол заседания кафедры No \_\_\_ от "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института фундаментальной медицины и биологии:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_\_ от "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No

Казань  
2014

## 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) доцент, к.н. (доцент) Акберова Н.И. кафедра биохимии ИФМиБ отделение фундаментальной медицины , Natasha.Akberova@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Данный курс должен дать магистрантам представление о современных методах квантовой химии, а также возможностях различных квантово-химических методов расчета для моделирования элементарных стадий реакций

В рамках курса магистранты должны познакомиться с различными методами современной квантовой химии: неэмпирическими, теорией функционала плотности, полуэмпирическими методами, молекулярной механикой; иметь представление о приближениях и допущениях заложенных в квантово-химические методы, о возможностях методов и целесообразности их использования для моделирования различных химических реакций.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М1.В.1 Общенаучный" основной образовательной программы 020400.68 Биология и относится к вариативной части. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Курс "Квантовая химия" тесно связан со многими дисциплинами. Необходимо иметь базовые знания химии, физики. Перед изучением курса рекомендуется вспомнить такие разделы высшей математики, как комплексные числа и функции комплексной переменной, техника дифференцирования и интегрирования, векторная алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения.

Освоение дисциплины "Основы квантовой химии" необходимо как предшествующее для таких дисциплин, как "Компьютерные технологии и в биологии. Программирование и математическое моделирование.", "Дизайн лекарственных препаратов", "Дизайн ферментов с заданными свойствами". Понятия и методы, используемые в курсе "Квантовая химия", будут применены при выполнении выпускной квалификационной работы.

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

| Шифр компетенции                        | Расшифровка приобретаемой компетенции   |
|---|---|
| ПК-10<br>(профессиональные компетенции) | глубоко понимает и творчески использует в научной и производственно-технологической деятельности знания фундаментальных и прикладных разделов специальных дисциплин магистерской программы (ПК-10); |
| ПК-2<br>(профессиональные компетенции)  | знает и использует основные теории, концепции и принципы в избранной области деятельности, способен к системному мышлению (ПК-2);   |

| Шифр компетенции                       | Расшифровка приобретаемой компетенции  |
|--|--|
| ПК-3<br>(профессиональные компетенции) | самостоятельно анализирует имеющуюся информацию, выявляет фундаментальные проблемы, ставит задачу и выполняет полевые, лабораторные биологические исследования при решении конкретных задач по специализации с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств, демонстрирует ответственность за качество работ и научную достоверность результатов (ПК-3); |

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные современные методы квантовой химии, ограничения их использования.

2. должен уметь:

пользоваться существующими программными комплексами для моделирования химических реакций.

3. должен владеть:

представлениями об основных квантово-химических понятиях и приближениях, используемых в квантовой химии.

применять современные квантово-химические методы для моделирования реакций и процессов

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

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

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен 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<br>Дисциплины/<br>Модуля  | Семестр | Неделя<br>семестра | Виды и часы<br>аудиторной работы,<br>их трудоемкость<br>(в часах) |                         |                        | Текущие формы<br>контроля |
|----|--|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|---------------------------|
|    |  |         |                    | Лекции  | Практические<br>занятия | Лабораторные<br>работы |                           |
| 1. | Тема 1. Введение.<br>Основные<br>квантово-химические<br>понятия. Главные<br>тенденции в развитии<br>квантовой химии как<br>основного<br>теоретического<br>фундамента<br>современной науки.<br>Обзор возможностей<br>использования<br>методов квантовой<br>химии для изучения<br>механизмов<br>химических реакций | 1       |                    | 1   | 0                       | 0                      | устный опрос              |
| 2. | Тема 2. Основные<br>постулаты квантовой<br>механики и квантовой<br>химии. Оператор<br>Гамильтона<br>(гамильтониан).<br>Уравнение<br>Шредингера и способы<br>его решения.<br>Стационарное<br>уравнение<br>Шредингера.<br>Простейшие примеры<br>применения квантовой<br>механики.                                  | 1       |                    | 2   | 0                       | 0                      | устный опрос              |
| 3. | Тема 3. Молекулярная<br>механика.<br>Ограниченность<br>применения методов<br>квантовой механики<br>для больших молекул.<br>Методы молекулярной<br>механики.  | 1       |                    | 2   | 0                       | 0                      | устный опрос              |
| 4. | Тема 4. Современное<br>программное<br>обеспечение<br>квантово-химических<br>расчетов.<br>Использование<br>современных программ<br>для проведения<br>квантово-химических<br>расчетов. Chemcraft,<br>Gaussian, PC<br>GAMESS.   | 1       |                    | 0   | 10                      | 0                      | контрольная<br>работа     |

| N  | Раздел<br>Дисциплины/<br>Модуля   | Семестр | Неделя<br>семестра | Виды и часы<br>аудиторной работы,<br>их трудоемкость<br>(в часах) |                         |                        | Текущие формы<br>контроля |
|----|---|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|---------------------------|
|    |   |         |                    | Лекции  | Практические<br>занятия | Лабораторные<br>работы |                           |
| 5. | Тема 5. Способы задания исходных координат атомов. Оптимизация геометрии. Нахождение локальных минимумов и переходных состояний. Расчет колебательных частот.   | 1       |                    | 2   | 8                       | 0                      | контрольная работа        |
| 6. | Тема 6. Основные задачи, решаемые при помощи методов квантовой химии. Выбор расчетного метода для решения различных химических задач.   | 1       |                    | 1   | 0                       | 0                      | контрольная работа        |
| 7. | Тема 7. Точность методов квантовой химии. Сравнение результатов квантово-химических расчетов с экспериментальными данными.  | 1       |                    | 0   | 2                       | 0                      | контрольная работа        |
| 8. | Тема 8. Моделирование малых молекул, биоорганических молекул и поверхности методами квантовой химии.  | 1       |                    | 0   | 4                       | 0                      | контрольная работа        |
| 9. | Тема 9. Применение методов квантовой химии для моделирования реакций. Понятия поверхности потенциальной энергии и координаты реакции. Изучение механизмов реакций методами современной квантовой химии. Моделирование поверхности методами квантовой химии. | 1       |                    | 0   | 4                       | 0                      | контрольная работа        |
|    | Тема . Итоговая форма контроля  | 1       |                    | 0   | 0                       | 0                      | экзамен                   |

| N     | Раздел<br>Дисциплины/<br>Модуля | Семестр | Неделя<br>семестра | Виды и часы<br>аудиторной работы,<br>их трудоемкость<br>(в часах) |                         |                        | Текущие формы<br>контроля |
|-------|---------------------------------|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|---------------------------|
|       |                                 |         |                    | Лекции  | Практические<br>занятия | Лабораторные<br>работы |                           |
| Итого |                                 |         |                    | 8   | 28                      | 0                      |                           |

#### 4.2 Содержание дисциплины

**Тема 1. Введение. Основные квантово-химические понятия. Главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной науки. Обзор возможностей использования методов квантовой химии для изучения механизмов химических реакций**

**лекционное занятие (1 часа(ов)):**

Основные квантово-химические понятия. Главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной науки. Обзор возможностей использования методов квантовой химии для изучения механизмов химических реакций

**Тема 2. Основные постулаты квантовой механики и квантовой химии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Уравнение Шредингера и способы его решения.**

**Стационарное уравнение Шредингера. Простейшие примеры применения квантовой механики.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Основные постулаты квантовой механики и квантовой химии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Уравнение Шредингера и способы его решения. Стационарное уравнение Шредингера. Простейшие примеры применения квантовой механики.

**Тема 3. Молекулярная механика. Ограниченность применения методов квантовой механики для больших молекул. Методы молекулярной механики.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Молекулярная механика. Ограниченность применения методов квантовой механики для больших молекул. Методы молекулярной механики.

**Тема 4. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.**

**Использование современных программ для проведения квантово-химических расчетов. Chemcraft, Gaussian, PC GAMESS.**

**практическое занятие (10 часа(ов)):**

Использование современных программ для проведения квантово-химических расчетов. Chemcraft, Gaussian, PC GAMESS.

**Тема 5. Способы задания исходных координат атомов. Оптимизация геометрии.**

**Нахождение локальных минимумов и переходных состояний. Расчет колебательных частот.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Способы задания исходных координат атомов.

**практическое занятие (8 часа(ов)):**

Оптимизация геометрии. Нахождение локальных минимумов и переходных состояний. Расчет колебательных частот.

**Тема 6. Основные задачи, решаемые при помощи методов квантовой химии. Выбор расчетного метода для решения различных химических задач.**

**лекционное занятие (1 часа(ов)):**

Основные задачи, решаемые при помощи методов квантовой химии. Выбор расчетного метода для решения различных химических задач.

**Тема 7. Точность методов квантовой химии. Сравнение результатов квантово-химических расчетов с экспериментальными данными.**

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

Сравнение результатов квантово-химических расчетов с экспериментальными данными.

**Тема 8. Моделирование малых молекул, биоорганических молекул и поверхности методами квантовой химии.****практическое занятие (4 часа(ов)):**

Моделирование малых молекул, биоорганических молекул и поверхности методами квантовой химии

**Тема 9. Применение методов квантовой химии для моделирования реакций. Понятия поверхности потенциальной энергии и координаты реакции. Изучение механизмов реакций методами современной квантовой химии. Моделирование поверхности методами квантовой химии.****практическое занятие (4 часа(ов)):**

Понятия поверхности потенциальной энергии и координаты реакции. Изучение механизмов реакций методами современной квантовой химии. Моделирование поверхности методами квантовой химии.

**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. Введение. Основные квантово-химические понятия. Главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной науки. Обзор возможностей использования методов квантовой химии для изучения механизмов химических реакций | 1       |                 | подготовка к устному опросу           | 6                      | устный опрос                          |
| 2. | Тема 2. Основные постулаты квантовой механики и квантовой химии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Уравнение Шредингера и способы его решения. Стационарное уравнение Шредингера. Простейшие примеры применения квантовой механики.                               | 1       |                 | подготовка к устному опросу           | 6                      | устный опрос                          |

| N  | Раздел Дисциплины   | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной работы |
|----|---|---------|-----------------|---------------------------------------|------------------------|---------------------------------------|
| 3. | Тема 3. Молекулярная механика. Ограниченность применения методов квантовой механики для больших молекул. Методы молекулярной механики.  | 1       |                 | подготовка к устному опросу           | 6                      | устный опрос                          |
| 4. | Тема 4. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Использование современных программ для проведения квантово-химических расчетов. Chemcraft, Gaussian, PC GAMESS. | 1       |                 | подготовка к контрольной работе       | 2                      | контрольная работа                    |
| 5. | Тема 5. Способы задания исходных координат атомов. Оптимизация геометрии. Нахождение локальных минимумов и переходных состояний. Расчет колебательных частот.                             | 1       |                 | подготовка к контрольной работе       | 5                      | отчет                                 |
| 6. | Тема 6. Основные задачи, решаемые при помощи методов квантовой химии. Выбор расчетного метода для решения различных химических задач.   | 1       |                 | подготовка к контрольной работе       | 5                      | контрольная работа                    |
| 7. | Тема 7. Точность методов квантовой химии. Сравнение результатов квантово-химических расчетов с экспериментальными данными.  | 1       |                 | подготовка к контрольной работе       | 2                      | контрольная работа                    |

| N  | Раздел Дисциплины   | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной работы |
|----|---|---------|-----------------|---------------------------------------|------------------------|---------------------------------------|
| 8. | Тема 8. Моделирование малых молекул, биоорганических молекул и поверхности методами квантовой химии.  | 1       |                 | подготовка к контрольной работе       | 2                      | контрольная работа                    |
| 9. | Тема 9. Применение методов квантовой химии для моделирования реакций. Понятия поверхности потенциальной энергии и координаты реакции. Изучение механизмов реакций методами современной квантовой химии. Моделирование поверхности методами квантовой химии. | 1       |                 | подготовка к контрольной работе       | 2                      | контрольная работа                    |
|    | Итого   |         |                 |                                       | 36                     |                                       |

## 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

В процессе освоения дисциплины используются следующие образовательные технологии, способы и методы формирования компетенций: лекция-визуализация, проблемная лекция, дискуссия, проблемно-исследовательская беседа, творческие задания, проектные технологии, просмотр, анализ и обсуждение видео- и мультимедийных материалов. Активно используются интерактивные информационные технологии для проведения как практических занятий, так и при самостоятельной работе магистрантов.

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

**Тема 1. Введение. Основные квантово-химические понятия. Главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной науки. Обзор возможностей использования методов квантовой химии для изучения механизмов химических реакций**

устный опрос , примерные вопросы:

Устный опрос по дисциплине проводится в форме проблемно-исследовательской беседы

**Тема 2. Основные постулаты квантовой механики и квантовой химии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Уравнение Шредингера и способы его решения. Стационарное уравнение Шредингера. Простейшие примеры применения квантовой механики.**

устный опрос , примерные вопросы:

Устный опрос по дисциплине проводится в форме проблемно-исследовательской беседы

### **Тема 3. Молекулярная механика. Ограниченность применения методов квантовой механики для больших молекул. Методы молекулярной механики.**

устный опрос , примерные вопросы:

Устный опрос по дисциплине проводится в форме проблемно-исследовательской беседы

### **Тема 4. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Использование современных программ для проведения квантово-химических расчетов. Chemcraft, Gaussian, PC GAMESS.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Контрольная работа по разделам дисциплины проводится на компьютерах с использованием специального программного обеспечения.

### **Тема 5. Способы задания исходных координат атомов. Оптимизация геометрии. Нахождение локальных минимумов и переходных состояний. Расчет колебательных частот.**

отчет , примерные вопросы:

Контрольная работа по разделам дисциплины проводится на компьютерах с использованием специального программного обеспечения.

### **Тема 6. Основные задачи, решаемые при помощи методов квантовой химии. Выбор расчетного метода для решения различных химических задач.**

контрольная работа, примерные вопросы:

Контрольная работа по разделам дисциплины проводится на компьютерах с использованием специального программного обеспечения.

### **Тема 7. Точность методов квантовой химии. Сравнение результатов квантово-химических расчетов с экспериментальными данными.**

контрольная работа, примерные вопросы:

Контрольная работа по разделам дисциплины проводится на компьютерах с использованием специального программного обеспечения.

### **Тема 8. Моделирование малых молекул, биоорганических молекул и поверхности методами квантовой химии.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Контрольная работа по разделам дисциплины проводится на компьютерах с использованием специального программного обеспечения.

### **Тема 9. Применение методов квантовой химии для моделирования реакций. Понятия поверхности потенциальной энергии и координаты реакции. Изучение механизмов реакций методами современной квантовой химии. Моделирование поверхности методами квантовой химии.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Контрольная работа по разделам дисциплины проводится на компьютерах с использованием специального программного обеспечения.

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

Примерные вопросы к экзамену:

Итоговый контроль осуществляется в форме устного экзамена, на котором магистрантам необходимо ответить на вопросы билетов. Результат экзамена проставляется в приложении к диплому.

На экзамене магистрант имеет возможность получить максимальное число баллов - 50.

Магистрант может получить следующие оценки с учетом продемонстрированных знаний:

- 41-50 баллов - должен безошибочно ответить на вопросы, представленные в билете, а также продемонстрировать свободное владение материалом при ответе на дополнительные вопросы;

- 31-40 баллов - безошибочно ответил на вопросы, представленные в билете, ноне точно или не в полном объеме раскрыл дополнительно заданные вопросы;

- 21-30 баллов - ответил на вопросы, представленные в билете, но затрудняется в ответах на дополнительные вопросы;
  - 11-20 баллов - затрудняется в ответах на вопросы билета, отвечает только после наводящих вопросов, демонстрируя слабое знание при ответе на дополнительные вопросы;
  - 10 баллов и менее - продемонстрировал слабые знания при ответе на вопросы, сформулированные в билете, не ответил ни на один из дополнительных вопросов;
- Магистрант, не явившийся на экзамен без уважительной причины, также получает 0 баллов.

Примерные вопросы для экзаменационных билетов:

1. Основные понятия квантовой химии. Области применения и назначение квантовой химии
2. Волновая функция, ее физический смысл, основные свойства.
3. Элементы квантовой механики. Уравнение Шредингера Решение уравнения Шредингера для задачи о движении частицы в потенциальном ящике.
4. Концепция ППЭ. Оценка физико-химических свойств вещества и реакционной способности на основе изучения ППЭ. Стационарные точки, локальные минимумы и переходные состояния.
5. Оптимизация геометрии, поиск переходных состояний. Определение термодинамических параметров реакций и констант скорости на основе исследования ППЭ.
6. Проблема выбора базиса АО.
7. Использование современных программ для проведения квантово-химических расчетов.
8. Способы задания исходных координат атомов. Оптимизация геометрии. Нахождение локальных минимумов и переходных состояний.
9. Выбор расчетного метода для решения различных химических задач. Точность методов квантовой химии. Сравнение результатов квантово-химических расчетов с экспериментальными данными.
10. Моделирование малых молекул, методами квантовой химии.
11. Использование квантовой химии для моделирования реакций
12. Формат Input-файла PC GAMESS

### 7.1. Основная литература:

1. Гельман, Ганс. Квантовая химия / Г. Гельман; с предисл. и коммент. д. физ.-мат. наук А. Л. Чугреева и доп. Г. Гельмана мл..?2-е изд., доп..?Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011.?533 с.: ил.; 24.?(Классика и современность, Естествознание).?Библиогр. в конце гл..?ISBN 978-5-94774-768-3((в пер.)), 300 .? <URL:http://z3950.ksu.ru/bcover/0000688780\_con.pdf>
- 2.Новосадов, Борис Константинович. Методы математической физики молекулярных систем / Б. К. Новосадов; Российская акад. наук, Ин-т геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского.?Москва: URSS, [2010].?383 с.: ил.; 22 см.?Библиогр. в конце гл..?Предм. указ.: с. 381-383.?ISBN 978-5-397-01046-7(в пер.) .? <URL:http://z3950.ksu.ru/bcover/0-781942\_con.pdf>

### 7.2. Дополнительная литература:

1. Аминова, Роза Мухаметовна. Основы современной квантовой химии: учебное пособие для студентов и магистрантов физ. и хим. фак. Казан. гос. ун-та / Р. М. Аминова.?Казань: [б. и.], 2004.?105 с.: ил..?Библиогр.: с. 105.
2. Аминова Роза М. Расчеты электронного строения и свойств молекул полуэмпирическими методами квантовой химии: Метод. пособие для работы на компьютере: Учеб. пособие для студентов четвертого курса и магистрантов физ. и хим. фак. / Р.М.Аминова.?Казань: КГУ, 1999.?71с..?В надзаг.: Казан. гос. ун-т, Физ. фак..?Библиогр.: с.71.?5.00.

3. Аминова Роза М. Полуэмпирические квантовохимические методы вычисления электронного строения и свойств молекул: (теорет. основы): Учеб. пособие для студентов четвертого курса и магистрантов физ. и хим. фак. / Р.М.Аминова. Казань: КГУ, 1999. 61 с. В надзаг.: Казан. гос. ун-т, Физ. фак. Библиогр.: с.61. 5.00.

4. Шапник, Михаил Самойлович. Избранные главы теоретической химии: учеб. пособие / М.С. Шапник; Казан. гос. технол. ун-т. Казань: Изд-во Казан. гос. технол. ун-та, 2004. 229 с.: ил. Библиогр.: с. 225-227. ISBN 5-7882-0238-8.

### 7.3. Интернет-ресурсы:

Работа в GAMESS - <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>

Визуализация структур - <http://sv-journal.com/2010-4/03/index.html>

Как понимать квантовую механику -

<http://freescb.info/story/uchebnik-po-kvantovoy-mehanike-i-kratkiy-konspekt-lekciy>

Книги по квантовой механике -

[http://mirknig.com/knigi/nauka\\_ucheba/1181159337-kvantovaja-mekhanika.html](http://mirknig.com/knigi/nauka_ucheba/1181159337-kvantovaja-mekhanika.html)

Книги по квантовой химии - <http://www.twirpx.com/files/chidnustry/quantum/>

Программы для моделирования - [http://chemfac.ssu.samara.ru/KOChem/kvant\\_prog.htm](http://chemfac.ssu.samara.ru/KOChem/kvant_prog.htm)

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

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

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

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020400.68 "Биология" и магистерской программе Биоинформатика .

Автор(ы):

Акберова Н.И. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Тарасов Д.С. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.