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: Физическая химия
Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2020

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. (доцент) 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
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения;
ОПК-4	Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач:

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.О.17 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия (Физическая химия)" и относится к обязательным дисциплинам.

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 - 57 часа(ов), в том числе лекции - 28 часа(ов), практические занятия - 28 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 1 часа(ов).

Самостоятельная работа - 51 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

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

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. Определение трехмерной структуры молекул	9	2	2	0	4
2.	Тема 2. Постулаты квантовой механики	9	5	2	0	5
3.	Тема 3. Орбитальное приближение и метод Хартри	9	3	0	0	4
4.	Тема 4. Учет антисимметрии волновой функции и метод Хартри-Фока	9	4	4	0	4
5.	Тема 5. Базовые понятия квантовохимического моделирования: базисные наборы, суперпозиционная ошибка	9	5	6	0	4
6.	Тема 6. Электронные характеристики молекул и их вычисление	9	3	4	0	4
7.	Тема 7. Полуэмпирические методы в моделировании	9	3	2	0	5
8.	Тема 8. Теория функционала плотности и ее применение	9	3	2	0	5
9.	Тема 9. Выполнение и защита практической работы	9	0	6	0	16
	Итого		28	28	0	51

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Определение трехмерной структуры молекул

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. Постулаты квантовой механики

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. Орбитальное приближение и метод Хартри

Построение приближенных решений электронного уравнения. Приближение Борна-Оппенгеймера. Адиабатическое приближение. Неадибатическое решение стационарного уравнения Шредингера. Границы применимости адиабатического приближения. Исходные физические предпосылки, схема подхода, поверхность потенциальной энергии ядер молекулы, равновесная геометрическая конфигурация ядер, гармоническое приближение колебаний ядер молекулы. Орбитальное приближение: приближение Хартри.

Тема 4. Учет антисимметрии волновой функции и метод Хартри-Фока

Детерминант Слэйтера. Метод Хартри-Фока: общая идея, схема подхода, детерминантные волновые функции, полная энергия молекулярной системы и орбитальные энергии, теорема Купманса. 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.

Тема 5. Базовые понятия квантовохимического моделирования: базисные наборы, суперпозиционная ошибка

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

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. Электронные характеристики молекул и их вычисление

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. Полуэмпирические методы в моделировании

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. Теория функционала плотности и ее применение

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. Выполнение и защита практической работы

Выполнение и защита практической работы (творческое задание). Применение полученных знаний на практике. Выбор адекватного расчетного приближения. Подготовка данных для использования в программе для квантово-химических расчетов. Оптимизация геометрии рассматриваемых молекул. Поиск переходного состояния системы. Расчет барьера активации.

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;

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

- 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.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

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	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 практической работы, сдаче экзамена, выполнение домашнего задания. 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. 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.
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.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

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 специальности: 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации "Физическая химия".

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.О.17 Квантовая химия

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия
Специализация: Физическая химия
Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2020

Основная литература:

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. - 4-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - ISBN 978-5-00101-502-4. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/94104 (дата обращения: 27.02.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

2. Каплан, И. Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы : учебное пособие / И. Г. Каплан ; под редакцией Н. Ф. Степанова ; перевод с английского Д. С. Безрукова,И. Г. Рябинкина. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 397 с. - ISBN 978-5-00101-503-1. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/94111 (дата обращения: 27.02.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

3. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул : учебное пособие / И. Майер ; под редакцией А. Л. Чугреева ; перевод с английского М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 387 с. - ISBN 978-5-00101-501-7. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/94102 (дата обращения: 27.02.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

4. Кочелаев, Б. И. 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. - Текст : электронный. - URL: http://zilant.kpfu.ru/course/view.php?id=376 (дата обращения: 27.02.2020).

Дополнительная литература:

1. Шпольский, Э. В. Атомная физика : учебник : в 2 томах / Э. В. Шпольский. - 6-е изд, стер. - Санкт-Петербург : Лань, [б. г.]. - Том 2 : Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома - 2010. - 448 с. - ISBN 978-5-8114-1006-4. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/443 (дата обращения: 27.02.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

2. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. - Санкт-Петербург : Лань, 2010. - 384 с. - ISBN 978-5-8114-1032-3. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/156 (дата обращения: 27.02.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.О.17 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: Физическая химия
Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2020

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.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ