


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. Гаюровский

01 » июня 2021 г.



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Современные теории химической связи

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2022

Содержание

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

Программу дисциплины разработал(а)(и): доцент, к.н. (доцент) Штырлин В.Г. (Кафедра неорганической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Valery.Shtyrlin@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-1	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения
ОПК-2	Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

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.

Должен уметь:

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

Должен владеть:

- описания симметрии молекул и твердых тел;
- расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- 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.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.О.04.02 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Хемоинформатика и молекулярное моделирование)" и относится к обязательной части ОПОП ВО.

Осваивается на 1 курсе в 2 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 4 зачетных(ые) единиц(ы) на 144 часа(ов).

Контактная работа - 41 часа(ов), в том числе лекции - 20 часа(ов), практические занятия - 20 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 1 часа(ов).

Самостоятельная работа - 103 часа(ов).

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

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет во 2 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	Се- местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само- стоя- тель- ная ра- бота
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи- ческие занятия, всего	Практи- ческие в эл. форме	Лабора- торные работы, всего	Лабора- торные в эл. форме	
1.	Тема 1. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход	2	2	0	2	0	0	0	10
2.	Тема 2. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп).	2	2	0	2	0	0	0	10
3.	Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах.	2	2	0	2	0	0	0	10
4.	Тема 4. Квантовая химия: основные принципы.	2	2	0	2	0	0	0	10
5.	Тема 5. Квантовая химия молекул.	2	2	0	2	0	0	0	10
6.	Тема 6. Химическая связь в молекулах.	2	2	0	2	0	0	0	10
7.	Тема 7. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах".	2	2	0	2	0	0	0	10
8.	Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях.	2	2	0	2	0	0	0	10
9.	Тема 9. Электронная структура твердых тел.	2	2	0	2	0	0	0	10
10.	Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий.	2	2	0	2	0	0	0	13
	Итого		20	0	20	0	0	0	103

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

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

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

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).

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.

Решение задач на редукцию приводимых представлений.

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

Операции открытой симметрии. Кристаллические системы. Решетки Бравэ. Пространственные группы. Антисимметрия. Магнитные и цветные группы симметрии. Описание магнитно-упорядоченных кристаллов. Описание тензоров свойств кристаллов. Решение задач на определение пространственных групп симметрии и характеристик твердых тел.

Тема 4. Квантовая химия: основные принципы.

Основные принципы квантовой механики. Атом водорода. Многоэлектронные атомы. Линейный вариационный метод Ритца. Одноэлектронная модель. Волновая функция Хартри. Метод самосогласованного поля. Атомные орбитали. Орбитали слейтеровского типа. Спин-орбиталь. Принцип Паули. Детерминант Слейтера. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.

Тема 5. Квантовая химия молекул.

Функционал энергии. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционные функционалы. Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера. Обменное взаимодействие. Электронная плотность в молекулах. Метод самосогласованного поля. Базисные наборы. Молекулярные интегралы. Электронная корреляция.

Тема 6. Химическая связь в молекулах.

Силовой и энергетический подходы к описанию химической связи. Орбитальное описание химической связи. Молекулярные орбитали. Анализ заселенностей орбиталей. Пространственное распределение электронной плотности. Дырка Ферми. Многоатомные молекулы. Симметризованные (групповые) орбитали в разложении ЛКАО МО.

Тема 7. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах".

Подход Бейдера (энергетический аспект). Подход Бейдера (топологический аспект). Критические точки электронной плотности. Критическая точка связи. Связевой путь. Лапласиан электронной плотности. Эллиптичность. Плотность электронной энергии. Критерии Наканиши-Хаяши-Нарахара. Порядок связи. Топологические и энергетические характеристики связей различных типов.

Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях.

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.

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

Тема 9. Электронная структура твердых тел.

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

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

Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий.

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

Анализ результатов оптимизации структур с Ван-дер-Ваальсовыми взаимодействиями, донорно-акцепторных молекулярных комплексов, водородной связью, супрамолекулярных комплексов.

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 науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-99бин/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 планируемому результату 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)

Basis Set Exchange - <https://bse.pnl.gov/bse/portal>

Firefly - <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/>

Gaussian Website - <http://www.gaussian.com/>

поисковая система - www.google.ru

химическая связь - http://ru.wikiversity.org/wiki/Химическая_связь

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

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	<p>Изучение дисциплины следует начинать с проработки рабочей программы, особое внимание, уделяя целям и задачам, структуре и содержанию курса.</p> <p>Работа с конспектом лекций:</p> <p>Необходимо просматривать конспект сразу после занятий, отметьте материал конспекта лекций, который вызывает затруднения для понимания. Попробуйте найти ответы на затруднительные вопросы, используя рекомендуемую литературу. Если самостоятельно не удалось разобраться в материале, сформулируйте вопросы и обратитесь за помощью к преподавателю на консультации или ближайшей лекции. Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам.</p>
практические занятия	<p>Во время практических работ необходимо постоянно углублять свои представления об основных понятиях, концепциях, принципах и законах природы, которые были предметом рассмотрения на соответствующих лекционных занятиях. Перед началом каждого практического занятия полезно еще раз просмотреть рабочую программу и спросить себя, в какой мере Вы уже сумели достичь сформулированных в ней целей и решить поставленные задачи курса. Если ответ на этот вопрос Вас не удовлетворит, повторите, пожалуйста, пройденный материал по конспектам лекций и их презентациям. Если же этого окажется недостаточным, обратитесь к рекомендованной литературе, а при необходимости сформулируйте проблемные вопросы и попросите помощи преподавателя на консультации или ближайшей лекции.</p>
самостоятельная работа	<p>Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студентов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:</p> <ul style="list-style-type: none"> - чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; - подготовку к практическим занятиям, лабораторным работам и курсовой работе; - работу с Интернет-источниками; - подготовку к сдаче практических работ, выполнению тестовых заданий и сдаче зачетов и экзаменов. <p>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.</p>

Вид работ	Методические рекомендации
зачет	<p>На зачете определяется качество и объем усвоенных студентами знаний, способность к обобщению, анализу, восприятию информации, постановки цели и выбору путей ее достижения, а также умение работать с нормативными документами в рамках дисциплины. Он может проводиться в устной или письменной формах. Форму проведения определяет кафедра. Подготовка к зачету - процесс индивидуальный. Тем не менее, существуют некоторые правила, знания которых могут быть полезны для всех. Залогом успешной сдачи зачета является систематическая работа над учебной дисциплиной в течение семестра. Подготовку желательно вести, исходя из требований программы учебной дисциплины. Целесообразно пошаговое освоение материала, выполнение различных заданий по мере изучения соответствующих содержательных разделов дисциплины. Если, готовясь к зачету, вы испытываете затруднения, обращайтесь за советом к преподавателю, тем более что при систематической подготовке у вас есть такая возможность. Готовясь к зачету, лучше всего сочетать повторение теоретических вопросов с выполнением практических заданий. Требования к знаниям студентов определены федеральным государственным образовательным стандартом и рабочей программой дисциплины. Цель зачета - проверка и оценка уровня полученных студентом специальных познаний по учебной дисциплине и соответствующих им умений и навыков, а также умения логически мыслить, аргументировать избранную научную позицию, реагировать на дополнительные вопросы, ориентироваться в массиве информации, дефиниций и категорий. Оценка подлежат правильность и грамотность речи студента, если зачет проводится в устной форме, а также его достижения в течение семестра. Дополнительной целью зачета является формирование у студентов таких качеств, как организованность, ответственность, трудолюбие, самостоятельность. Таким образом, проверяется сложившаяся у студента система знаний по дисциплине, что играет большую роль в подготовке будущего специалиста, способствует получению им фундаментальной и профессиональной подготовки. При подготовке к зачету важно правильно и рационально распланировать свое время, чтобы успеть на качественно высоком уровне подготовиться к ответам по всем вопросам. Во время подготовки к зачету студенты также систематизируют знания, которые они приобрели при изучении основных тем курса в течение семестра. Это позволяет им уяснить логическую структуру дисциплины, объединить отдельные темы в единую систему, увидеть перспективы ее развития. Самостоятельная работа по подготовке к зачету во время сессии должна планироваться студентом, исходя из общего объема вопросов, вынесенных на зачет, так, чтобы за предоставленный для подготовки срок он смог равномерно распределить приблизительно равное количество вопросов для ежедневного изучения (повторения). Важно, чтобы один последний день (либо часть его) был выделен для дополнительного повторения всего объема вопросов в целом. Это позволяет студенту самостоятельно перепроверить усвоение материала.</p>

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

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

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

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

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

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

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

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

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

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

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Хемоинформатика и молекулярное моделирование".

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2022

Основная литература:

1. 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.
2. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. - 5-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 522 с. - ISBN 978-5-93208-518-9. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/172254> (дата обращения: 20.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Хемоинформатика: цифровой образовательный ресурс для студентов [Электронный образовательный ресурс]/Химический институт им. А.М. Бутлерова, кафедра органической химии/ Маджидов Т.И. - Казань: Казанский федеральный университет, 2013. - Режим доступа: URL: <https://edu.kpfu.ru/course/view.php?id=3011> (дата обращения: 20.05.2021). - Режим доступа: только для студентов и сотрудников КФУ.
4. Реутов, О. А. Органическая химия : учебник : в 4 частях / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; художники В. А. Чернецов [и др.]. - 9-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2021 - Часть 1 - 2021. - 570 с. - ISBN 978-5-906828-42-2. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/166749> (дата обращения: 20.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература:

1. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул : учебное пособие / И. Майер ; художник Н. В. Зотова. - 4-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 387 с. - ISBN 978-5-93208-516-5. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/166732> (дата обращения: 20.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Туб, М. Механизмы неорганических реакций : монография / М. Туб, Д. Берджесс ; перевод с английского Д. О. Чаркина, Г. М. Курамшиной ; художник Н. А. Новак. - 4-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 683 с. - ISBN 978-5-93208-546-2. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/166741> (дата обращения: 20.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Сироткин, О. С. Эволюция теории химического строения вещества А.М. Бутлерова в унитарную теорию строения химических соединений (основы единой химии) : монография / О. С. Сироткин. - Москва : ИНФРА-М, 2020. - 247 с. - (Научная мысль). - ISBN 978-5-16-009053-5. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1036451> (дата обращения: 20.05.2021). - Режим доступа : по подписке.
4. Лорд, Э. Э. Новая геометрия для новых материалов / Э. Э. Лорд, А. Л. Маккей, С. Ранганатан ; под редакцией В. Я. Шевченко, В. Е. Дмитриенко. - Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2010. - 260 с. - ISBN 978-5-9221-1243-7. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/48204> (дата обращения: 20.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

*Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.О.04.02 Современные теории химической связи*

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

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2022

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.