

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

Е.А. Турилова

17 февраля 2023 г.

*подписано электронно-цифровой подписью*

## Программа дисциплины

Компьютерные расчеты в химии

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Фундаментальная химия: материалы будущего

Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

## 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. Бухаров М.С. (Кафедра неорганической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Mihail.Buharov@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
ПК-5	Способен решать стандартные задачи при проведении исследовательской работы в выбранной области химии, в том числе с использованием компьютерных технологий

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

общие закономерности протекания химических реакций в растворах и твердой фазе, круг химических задач, которые могут быть решены с привлечением ЭВМ, алгоритмы реализации математических методов для физико-химических расчетов.

Должен уметь:

выбирать для проведения физико-химических расчетов подходящие вычислительные математические методы, выполнять обработку информации с использованием компьютерных технологий, применять методы математического моделирования для решения отдельных задач в химии.

Должен владеть:

методами проведения физико-химических расчетов, основами работы в программах Microsoft Excel и Avogadro.

**2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО**

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.02.02 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия (Фундаментальная химия: материалы будущего)" и относится к дисциплинам по выбору части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 2 курсе в 4 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 2 зачетных(ые) единиц(ы) на 72 часа(ов).

Контактная работа - 36 часа(ов), в том числе лекции - 18 часа(ов), практические занятия - 18 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 36 часа(ов).

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

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 4 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. История развития ЭВМ. Основы математического моделирования.	4	2	0	0	0	0	0	3
2.	Тема 2. Химические задачи, сводящиеся к решению нелинейных уравнений, и численные методы их решения.	4	2	1	2	2	0	0	5
3.	Тема 3. Химические задачи, сводящиеся к решению обыкновенных дифференциальных уравнений, и численные методы их решения.	4	4	2	4	2	0	0	5
4.	Тема 4. Численные методы оптимизации функций.	4	2	1	4	2	0	0	5
5.	Тема 5. Молекулярное моделирование. Классическая молекулярная механика и динамика.	4	4	2	4	0	0	0	8
6.	Тема 6. Методы Монте-Карло.	4	2	0	2	0	0	0	5
7.	Тема 7. Искусственные нейронные сети и их применение в химических исследованиях.	4	2	0	2	0	0	0	5
	Итого		18	6	18	6	0	0	36

##### 4.2 Содержание дисциплины (модуля)

###### Тема 1. История развития ЭВМ. Основы математического моделирования.

Первые вычислительные машины. Машины В. Шикарда, Б. Паскаля, Г. Лейбница, Ч. Бэббиджа. Арифмометр П.Л. Чебышева. Электромеханические машины. Первые универсальные ЭВМ. Развитие ЭВМ в СССР. Академик С.А. Лебедев и первая советская ЭВМ - МЭСМ. Троицкая ЭВМ "Сетунь". Основные этапы математического моделирования. Создание математической модели. Приближенный характер математической модели. Реализация математической модели. Алгоритм и программа. Способы записи алгоритмов. Численный эксперимент. Тестирование и отладка математической модели. Погрешности математического моделирования. Неустраняемая погрешность (погрешность модели) и устранимая погрешность (погрешность численного метода и погрешность вычислительная).

###### Тема 2. Химические задачи, сводящиеся к решению нелинейных уравнений, и численные методы их решения.

Моделирование химических равновесий, раствор слабой трехосновной кислоты, буферный раствор. Численные методы решения нелинейных алгебраических уравнений. Метод половинного деления. Метод хорд. Метод Ньютона. Критерии сходимости численного метода. Методы решения систем алгебраических уравнений, метод Ньютона-Рафсона. Общий подход к описанию химических равновесий, атомная матрица, стехиометрическая матрица, независимые компоненты (базис).

###### Тема 3. Химические задачи, сводящиеся к решению обыкновенных дифференциальных уравнений, и численные методы их решения.

Прямая задача химической кинетики. Численные методы нахождения производной функции, сеточные функции. Представление дифференциального уравнения в виде разностного уравнения. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Метод Эйлера, Рунге-Кутта, многошаговые методы. Устойчивость численного метода, выбор шага интегрирования. Численные методы решения систем дифференциальных уравнений первого порядка. Сведение решения дифференциальных уравнений высших порядков к решению системы дифференциальных уравнений первого порядка. Составление системы дифференциальных уравнений, соответствующей кинетической схеме реакции.

###### Тема 4. Численные методы оптимизации функций.

Обратная задача химической кинетики. Аппроксимация экспериментальных точек заданной функцией с параметрами. Локальный и глобальный экстремумы функции. Метод наименьших квадратов. Линейный регрессионный анализ методом наименьших квадратов в программе Microsoft Excel. Методы градиентного спуска, наискорейшего спуска, метод сопряженных градиентов, стохастический градиентный спуск. Метод оптимизации нулевого порядка Нелдера-Мида. Методы глобальной оптимизации. Генетический алгоритм. Условная оптимизация, метод штрафных функций. Решение задач оптимизации в программе Microsoft Excel с использованием надстройки "Поиск решения".

#### **Тема 5. Молекулярное моделирование. Классическая молекулярная механика и динамика.**

Приближения, используемые в классической молекулярной механике. Понятие силового поля. Основные типы взаимодействий, учитываемые при расчете потенциальной энергии системы, валентные и невалентные взаимодействия. Основные формы записи потенциалов взаимодействий. Основные наборы силовых полей. Применение программы Avogadro для создания, оптимизации и поиска конформеров молекул.

История развития МД моделирования. Алгоритмы интегрирования уравнений движения. Граничные условия. Термостаты и баростаты. Мезоскопические модели в молекулярной динамике. Учет растворителя в явном и неявном виде. Броуновская динамика. Обработка результатов МД моделирования: функция радиального распределения, RMSD, RMSF, расчет средних параметров системы. Пакеты программ моделирования. Программа Abalone.

#### **Тема 6. Методы Монте-Карло.**

История развития методов Монте-Карло. Вычисление площади фигуры, расчет определенного интеграла методами Монте-Карло. Канонический ансамбль и алгоритм Метрополиса. Микроканонический ансамбль. Мультиканонический ансамбль. Эргодическая гипотеза. Сравнение методов Монте-Карло и молекулярной динамики. Метод моделирования отжига. Фреймворк Rosetta.

#### **Тема 7. Искусственные нейронные сети и их применение в химических исследованиях.**

История развития и принципы построения искусственных нейросетей. Модель МакКаллока-Питтса, перцептрон Розенблатта. Обучение нейронных сетей. Виды функций активации. Структуры современных искусственных нейросетей. Способы описания структур исследуемых соединений. Применение нейросетевых алгоритмов для поиска зависимостей структура - свойство.

### **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 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)

Алексеев В. М. и др. Сборник задач по оптимизации: Теория, примеры, задачи - <https://e.lanbook.com/book/2097>

Диченко Я. Онлайн-курс "Компьютерное моделирование в химии" на платформе Stepik - <https://stepik.org/course/957/info>

Маслов М.М., Катин К.П., Гимальдинова М.А. Онлайн-курс "Методы молекулярной динамики в многоуровневом моделировании" на платформе Открытое образование - [https://openedu.ru/course/mephi/mephi\\_mdmitmsm/](https://openedu.ru/course/mephi/mephi_mdmitmsm/)

Трифонов А.Г. Постановка задачи оптимизации и численные методы ее решения - [https://hub.exponenta.ru/post/postanovka-zadachi-optimizatsii-i-chislennye-metody-ee-resheniya356#2\\_2\\_2](https://hub.exponenta.ru/post/postanovka-zadachi-optimizatsii-i-chislennye-metody-ee-resheniya356#2_2_2)

Щербаков И.Н. Материалы к лекционному курсу "Численные методы и программирование" - [http://physchem.chimfak.sfedu.ru/Source/num\\_lect.html](http://physchem.chimfak.sfedu.ru/Source/num_lect.html)

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

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	Работа с конспектом лекций: 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.
практические занятия	Необходимо проработать рекомендованную литературу, а также изучить руководства к расчетным программам и программам оптимизации геометрии молекул и молекулярного моделирования. Ознакомится с решениями типовых задач по расчету равновесного состава, прямой и обратной задач кинетики, аппроксимации данных, геометрических и энергетических характеристик молекул, по расчету методами молекулярной динамики.

Вид работ	Методические рекомендации
самостоятельная работа	<p>Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;</li> <li>- подготовку к практическим занятиям, лабораторным работам;</li> <li>- работу с Интернет-источниками;</li> <li>- подготовку к сдаче практических работ, выполнению тестовых заданий и сдаче экзамена.</li> </ul> <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>
зачет	<p>Успешная подготовка к зачету возможна лишь в случае систематической самостоятельной работы в ходе всего семестра. Непосредственно перед зачетом необходимо прочитать все конспекты лекций и решения типовых задач. При решении заданий в экзаменационном билете для рационального использования отведённого времени лучше вначале ответить на вопросы, которые вызывают меньше всего затруднений, решить расчётные задачи, а после вернуться к заданиям повышенной сложности.</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 специальности: 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации "Фундаментальная химия: материалы будущего".



Приложение 2  
к рабочей программе дисциплины (модуля)  
Б1.В.ДВ.02.02 Компьютерные расчеты в химии

**Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Фундаментальная химия: материалы будущего

Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

**Основная литература:**

1. Турецкий, В. Я. Математика и информатика: учебник / В.Я. Турецкий; Уральский государственный университет им. А.М. Горького. - 3-е изд., испр. и доп. - Москва: ИНФРА-М, 2010. - 558 с. (Высшее образование). ISBN 978-5-16-000171-5. - Текст: электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/206346> (дата обращения: 06.03.2020). - Режим доступа: по подписке.
2. Вычислительная математика в задачах химии и химической технологии: учебное пособие / Н.К. Нуриев, С.Д. Старыгина, Е.В. Пашукова. - Казань: Центр инновационных технологий, 2011. - 200 с.
3. Кручинин, Н.Ю. Метод молекулярной динамики при изучении структуры и конформационной динамики макромолекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах: учебное пособие / Н.Ю. Кручинин. - Оренбург: ОГУ, 2015. - 107 с. - Текст: электронный. - URL: <https://e.lanbook.com/reader/book/98079/#2> (дата обращения: 27.04.2021). - Режим доступа: по подписке.
4. Математическая обработка результатов химического эксперимента: учебно-методическое пособие / Н.А. Улахович, М.П. Кутырева, Л.Г. Шайдарова, Ю.И. Сальников. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2010. - 60 с.
5. Математическая обработка результатов химического эксперимента: учебно-методическое пособие для лекционного курса 'Метрология'/Н.А. Улахович, М.П. Кутырева, Л.Г. Шайдарова, Ю.И. Сальников.- Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2010. - 60 с. - Текст: электронный. - URL: [http://kpfu.ru/docs/F910466741/Mat\\_experiment.pdf](http://kpfu.ru/docs/F910466741/Mat_experiment.pdf) (дата обращения: 06.03.2020). - Режим доступа: открытый.

**Дополнительная литература:**

1. Каймин, В.А. Информатика: учебник / Каймин В.А. - 6-е изд. - Москва: НИЦ ИНФРА-М, 2016. - 285 с. - (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-16-102877-3. - Текст: электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/542614> (дата обращения: 06.03.2020). - Режим доступа : по подписке.
2. Безручко, В. Т. Информатика (курс лекций) : учебное пособие / В.Т. Безручко. - Москва: ИД 'ФОРУМ': ИНФРА-М, 2018. - 432 с. - (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-16-100311-4. - Текст: электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/944064> (дата обращения: 06.03.2020). - Режим доступа : по подписке.
3. Татаринев Д.А., Немтарев А.В. Онлайн поисковые системы научной информации. / учебно-методическое пособие. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2013. - 30 с. - Текст : электронный. - URL: [http://kpfu.ru/publication?p\\_id=72662](http://kpfu.ru/publication?p_id=72662) (дата обращения: 06.03.2020). - Режим доступа: открытый.
4. Основы компьютерного моделирования наносистем: учебное пособие / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. - СПб.: Издательство 'Лань', 2021. - 384 с. - Текст: электронный. - URL: <https://e.lanbook.com/reader/book/167744/#4> (дата обращения: 27.04.2021). - Режим доступа: по подписке.

*Приложение 3  
к рабочей программе дисциплины (модуля)  
Б1.В.ДВ.02.02 Компьютерные расчеты в химии*

**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: Фундаментальная химия: материалы будущего

Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

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 "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

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.