

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт физики



*подписано электронно-цифровой подписью*

## Программа дисциплины

Компьютерное моделирование молекулярных систем

Направление подготовки: 12.03.04 - Биотехнические системы и технологии

Профиль подготовки: Медицинская томография: физические принципы и приборостроение

Квалификация выпускника: бакалавр

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. Савостина Л.И. (Кафедра физики молекулярных систем, Отделение физики), Liudmila.Savostina@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-4	Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности
ПК-2	Способность к математическому моделированию элементов и процессов биотехнических систем, их исследованию на базе профессиональных пакетов автоматизированного проектирования и самостоятельно разработанных программных продуктов

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основы квантовохимических методов вычисления пространственной структуры и свойств молекул в газовой фазе;
- основы методов расчета физико-химических свойств молекулярных систем в газовой фазе с использованием полуэмпирических и неэмпирических методов квантовой химии, а также в рамках теории функционала плотности;
- знать методы и подходы, позволяющие анализировать и давать теоретическую интерпретацию наблюдаемым в эксперименте оптическим и магнитно-резонансным параметрам.

Должен уметь:

- применять квантовохимические методы для моделирования структуры молекулярных систем;
- использовать квантовохимические методы для расчетов физико-химических свойств молекул;
- работать с компьютером на уровне пользователя и обладать способностью применять полученные навыки работы с компьютерами в области профессиональной деятельности.

Должен владеть:

- практическими навыками в области построения структуры молекулы в газовой фазе;
- навыками расчетов структурных, термодинамических, физико-химических характеристик молекул, уметь интерпретировать полученные (рассчитанные) данные в ЯМР спектроскопии, в оптической и молекулярной спектроскопии;
- основными методами, способами и средствами получения, хранения и переработки информации;
- владеть навыками работы с компьютером как средством управления информацией;
- владеть навыками работы с учебной и научной литературой.

Должен демонстрировать способность и готовность:

к решению задач, связанных с атомно-молекулярным строением вещества, работать с современными образовательными и информационными технологиями.

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

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.01.04 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 12.03.04 "Биотехнические системы и технологии (Медицинская томография: физические принципы и приборостроение)" и относится к дисциплинам по выбору части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 4 курсе в 7 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 - 69 часа(ов), в том числе лекции - 16 часа(ов), практические занятия - 52 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 1 часа(ов).

Самостоятельная работа - 75 часа(ов).

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

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет с оценкой в 7 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-тельная 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. Введение в курс Компьютерное моделирование молекулярных систем.	7	4	0	10	0	0	0	15
2.	Тема 2. Многоэлектронные атомы.	7	4	0	10	0	0	0	15
3.	Тема 3. Методы расчета молекулярных систем.	7	4	0	12	0	0	0	15
4.	Тема 4. Квантово-химическое описание взаимодействий в молекулах.	7	2	0	10	0	0	0	15
5.	Тема 5. Невалентные взаимодействия в молекулярных системах.	7	2	0	10	0	0	0	15
	Итого		16	0	52	0	0	0	75

**4.2 Содержание дисциплины (модуля)**

**Тема 1. Введение в курс Компьютерное моделирование молекулярных систем.**

Предсказательные возможности современной квантовой химии. Связь между строением и свойствами молекул в биологии и медицине. Экспериментальные предпосылки квантовой механики: исследования атомных спектров, структуры атомов, открытие дискретности атомных состояний, открытие корпускулярных свойств света, открытие волновых свойств микрочастиц. Классическое описание структуры и динамики молекул. Механическая модель молекулы. Основные положения квантовой механики на примере атома водорода.

**Тема 2. Многоэлектронные атомы.**

Проблема решения уравнений Шредингера для многочастичных систем. Вариационный принцип решения уравнения Шредингера. Одноэлектронная модель и метод самосогласованного поля. Атомные орбитали. Структура многоэлектронной волновой функции и принцип Паули. Одноэлектронные уравнения в многоэлектронной теории: метод Хартри-Фока и метод Кона-Шэма. Электронная структура и свойства многоэлектронных атомов: термы, электронные конфигурации атомов.

**Тема 3. Методы расчета молекулярных систем.**

Приближение Борна-Оппенгеймера. Одноэлектронные уравнения для молекул: методы Хартри-Фока и Хартри-Фока-Рутана. Учет электронной корреляции: теория возмущения, метод связанных кластеров, метод валентных схем. Метод теории функционала плотности (DFT). Неэмпирические и полумпирические методы квантовой химии. Базисные функции. π-электронное приближение. Метод Хюккеля. Точность квантово-химических расчетов молекул.

**Тема 4. Квантово-химическое описание взаимодействий в молекулах.**

Квантово-химическое описание химической связи. Распределение электронной плотности. Силы в молекулах. Распределение энергии в молекулах. Многоатомные молекулы: локализация и гибридизация орбиталей, модели локализации электронов. Заряды на атомах. Дипольные и квадрупольные моменты молекул. Молекулярный электростатический потенциал.

**Тема 5. Невалентные взаимодействия в молекулярных системах.**

Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий: метод супермолекулы, методы теории возмущения. Межмолекулярные взаимодействия. Оценка энергии межмолекулярного взаимодействия. Кристаллохимический дизайн. Оценка ван-дер-ваальсовых атомных радиусов. Донорно-акцепторные молекулярные комплексы. Дипорно-акцепторные молекулярные комплексы. Водородная связь. Гибридные методы квантовая механика/молекулярная механика. Методы QM/MM.

### **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

Методические пособия по курсу - <https://kpfu.ru/metodicheskie-posobiya-studentam-4083.html>

### **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)**

Gamess - <http://www.msg.ameslab.gov/gamess/>

Gaussian - <http://gaussian.com/keywords/>

ORCA - <https://orcaforum.cec.mpg.de/>

Задачи по курсу - [http://kpfu.ru/docs/F1484311321/list\\_of\\_exercise.pdf](http://kpfu.ru/docs/F1484311321/list_of_exercise.pdf)

Задачи по курсу - [http://kpfu.ru/docs/F710814298/Exercise\\_mod.pdf](http://kpfu.ru/docs/F710814298/Exercise_mod.pdf)

Задачи по курсу - <http://kpfu.ru/docs/F2043134078/Exercise1.pdf>

Методические пособия Аминовой Р.М. - <https://kpfu.ru/metodicheskie-posobiya-studentam-4083.html>

Расчеты электронного строения и свойств молекул полуэмпирическими методами квантовой химии. Методическое пособие для работы на компьютере - [http://kpfu.ru/docs/F1139401699/on%20komp\\_QCh.pdf](http://kpfu.ru/docs/F1139401699/on%20komp_QCh.pdf)

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

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	Лекция - это логически стройное, системное, глубокое и ясное изложение учебного материала. Назначение современной лекции в учебном процессе в том, чтобы помочь освоить фундаментальные проблемы курса, овладеть методами научного познания, предложить новейшие достижения научной мысли. В учебном процессе лекция выполняет методологическую, организационную и информационную функции. В ряде случаев лекция является основным источником информации, например, при отсутствии учебников, учебных пособий по новым курсам. Лекция раскрывает понятийный аппарат конкретной области знания, ее проблемы, дает цельное представление о предмете, показывает взаимосвязь с другими дисциплинами. Все другие формы учебных занятий - семинары, лабораторные занятия, курсовое и дипломное проектирование, учебная практика, консультации, зачеты и экзамены - связаны с лекцией, опираются на фундаментальные положения и выводы.
практические занятия	Аудиторные практические занятия играют исключительно важную роль в выработке у студентов навыков применения полученных знаний для решения практических задач в процессе совместной деятельности с преподавателями. Практические занятия служат своеобразной формой осуществления связи теории с практикой. Структура практических занятий в основном одинакова - вступление преподавателя, вопросы студентов по материалу, который требует дополнительных разъяснений, собственно практическая часть, заключительное слово преподавателя. Разнообразие возникает в основной, собственно практической части, включающей рефераты, доклады, дискуссии, тренировочные упражнения, решение задач, наблюдения, эксперименты и т. д. Опыт показывает, что нельзя на практических занятиях ограничиваться выработкой только практических навыков, техникой решения задач, построения графиков и т. п. Студенты должны всегда видеть ведущую идею курса и связь ее с практикой. Цель занятий должна быть понятна не только преподавателю, но и студентам. Это придает учебной работе жизненный характер, утверждает необходимость овладения опытом профессиональной деятельности, связывает их с практикой жизни.



Вид работ	Методические рекомендации
самостоятельная работа	<p>Самостоятельная учебная работа представлена такими формами учебного процесса, как лекция, семинар, практические и лабораторные занятия, экскурсии, подготовка к ним. Студент должен уметь вести краткие записи лекций, составлять конспекты, планы и тезисы выступлений, подбирать литературу и т.д. Различают следующие уровни самостоятельной работы студента: низкий, средний, высокий. Для каждой специальности и дисциплины разрабатываются свои критерии оценки данных уровней. Ведущими путями самостоятельной работы студентов являются репродуктивный, самостоятельный и поисковый. Мотивы самообразования:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- стихийные, неустойчивые (любопытность, интерес к предмету, ко всему окружающему);</li> <li>- познавательные (рост самообразования);</li> <li>- социально - значимые (связанные с реализацией идеалов и жизненных планов, призвания).</li> </ul> <p>Различают следующие характеры знаний:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- локальный (не объединяются с другими, быстро забываются ? возрастает удельный вес знаний, улучшается их качество);</li> <li>- целостный (знания глубокие, прочные, разносторонние, универсальные).</li> </ul> <p>Умения работать с источниками:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- не систематизированы; студенты много читают, обращаются к дополнительной литературе эпизодично;</li> <li>- систематизированы: чтение вдумчивое; отмечается главное; делаются выписки;</li> <li>- рациональное применение различных источников информации: анализирует, соотносит с поставленными целями и задачами.</li> </ul>
зачет с оценкой	<p>Обычно зачет проводится по итогам семестра перед сессией в письменной или устной форме, причем преподаватель может включать в него вопросы как практических занятий, так и лекционных (что особенно уместно, когда по данному предмету не сдается экзамен). Главное отличие зачета от экзамена, почти всегда не пяти-, а двухбалльная система оценки (сдал- не сдал), что делает его получение несколько более простым делом. С другой стороны, порой процедура его сдачи достаточно сложна, а иногда применяется и пятибалльная оценка (так называемый дифференцированный зачет). Таким образом, для сдачи зачета необходимо, прежде всего, выполнить все требования преподавателя, что предполагает знание этих требований. Нужно как можно раньше выяснить, какие вопросы предстоит готовить и каковы правила самой процедуры (учитывается ли посещаемость, надо ли пропущенные занятия отрабатывать, а если надо, то каким образом и т.д.). Практика показывает, что хорошее посещение занятий является почти полной гарантией получения зачета, так как тогда можно быть в курсе всех требований преподавателя. И, напротив, большое количество пропусков может осложнить жизнь даже сильному студенту. Кроме того, необходимо учитывать, что проблемы могут появиться при распространенном подходе студента к практическим занятиям, когда многие работают первые месяцы вполсилы, накапливая задолженность по выполнению рефератов, практических заданий, конспектов и пр., а перед сессией пытаются все это сделать за одну неделю. Старайтесь распределять силы равномерно по всей дистанции семестра, и тогда зачетная неделя перед сессией будет не самой напряженной, а самой разгрузочной.</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 12.03.04 "Биотехнические системы и технологии" и профилю подготовки "Медицинская томография: физические принципы и приборостроение".



*Приложение 2*  
*к рабочей программе дисциплины (модуля)*  
*Б1.В.ДВ.01.04 Компьютерное моделирование молекулярных систем*

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

Направление подготовки: 12.03.04 - Биотехнические системы и технологии

Профиль подготовки: Медицинская томография: физические принципы и приборостроение

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

**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: 23.05.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. - 3-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2019. - 428 с. - ISBN 978-5-8114-3961-4. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/113631> (дата обращения: 23.05.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Крашенинин, В. И. Квантовая химия : учебное пособие / В. И. Крашенинин, Л. В. Кузьмина, Е. Г. Газенаур. - Кемерово : КемГУ, 2019. - 82 с. - ISBN 978-5-8353-2440-8. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/135217> (дата обращения: 23.05.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

**Дополнительная литература:**

1. Назмитдинов, Р. Г. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / Р. Г. Назмитдинов, С. А. Новикова. - Дубна : Государственный университет 'Дубна', 2021. - 123 с. - ISBN 978-5-89847-631-1. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/196986> (дата обращения: 23.05.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Аминова Р. М. Основы современной квантовой химии: учебное пособие для студентов и магистрантов физ. и хим. фак. Казан. гос. ун-та - Казань: [б. и.], 2004 - 105 с.

*Приложение 3*  
*к рабочей программе дисциплины (модуля)*  
*Б1.В.ДВ.01.04 Компьютерное моделирование молекулярных систем*

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

Направление подготовки: 12.03.04 - Биотехнические системы и технологии

Профиль подготовки: Медицинская томография: физические принципы и приборостроение

Квалификация выпускника: бакалавр

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.