

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования_
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением президиума Ученого совета ННГУ

протокол № 1 от 16.01.2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Основы супрамолекулярной химии

Уровень высшего образования

Магистратура

Направление подготовки / специальность

04.04.01 - Химия

Направленность образовательной программы

Физическая химия

Форма обучения

очно-заочная

г. Нижний Новгород

2024 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.О.02.02 Основы супрамолекулярной химии относится к обязательной части образовательной программы.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
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-1.1: Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук ОПК-1.2: Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук ОПК-1.3: Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	ОПК-1.1: Должен знать предмет супрамолекулярной химии; понятие супрамолекулярных ассоциатов, молекулярном распознавании; современные концепции теоретической супрамолекулярной химии, в том числе концепции молекулярного распознавания, самопроцессов, процессов адаптации и эволюции супрамолекулярных систем; принципы конструирования синтетических рецепторов ("хозяев", супрамолекулярных рецепторов, переносчиков, катализаторов); классификацию синтетических рецепторов (поданды, коронанды, криптанды, гемисферанды, циклофаны, халофаны и т.д.) ОПК-1.2: Должен знать, как использовать современное программное обеспечения по визуализации и анализу кристаллический структур супрамолекулярных соединений ОПК-1.3: Должен знать основные программные комплексы для	Доклад-презентация	Экзамен: Контрольные вопросы

		расчета и оптимизации геометрии супрамолекулярных соединений, особенности перехода от расчетов молекулярных к супрамолекулярным системам		
ОПК-2: Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	ОПК-2.1: Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их ОПК-2.2: Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	ОПК-2.1: Способен оценивать устойчивость и прогнозировать реакционную способность биологических супрамолекулярных систем в зависимости от природы, размера, строения, симметрии, жесткости структуры и других характеристик взаимодействующих частиц в том числе с применением расчетных программных продуктов ОПК-2.2: Должен уметь использовать информацию, представленную в научных публикациях для поиска в базах данных трехмерных пространственных структур, использовать базы данных структур органических, неорганических и биологических макромолекулярных соединений, сопоставлять результаты поиска и собственных научных результатов	Доклад-презентация	Экзамен: Контрольные вопросы

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очно-заочная
Общая трудоемкость, з.е.	4
Часов по учебному плану	144
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	18

- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	0
- КСР	2
самостоятельная работа	88
Промежуточная аттестация	36 Экзамен

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/ лабора- торные работы), часы	Всего	
	о з Ф о	о з Ф о	о з Ф о	о з Ф о	о з Ф о
1. Становление современной супрамолекулярной химии	5	1	0	1	4
2. Основные понятия и определения супрамолекулярной химии. Виды межмолекулярных взаимодействий	9	3	0	3	6
3. Супрамолекулярная химия в живой природе	8	2	0	2	6
4. Связывание катионов в супрамолекулярной химии	7	1	0	1	6
5. Связывание анионов в супрамолекулярной химии	7	1	0	1	6
6. Связывание нейтральных молекул в супрамолекулярной химии	7	1	0	1	6
7. Инженерия кристаллов	7	1	0	1	6
8. Темплаты и сборка	7	1	0	1	6
9. Молекулярные устройства	7	1	0	1	6
10. Биомиметика	5	1	0	1	4
11. Жидкие поверхности раздела, жидкие кристаллы и клатраты	7	1	0	1	6
12. Супрамолекулярное взаимодействие и катализ	8	2	0	2	6
13. Применение современных программных пакетов для анализа кристаллических	11	1	0	1	10
14. Применение современных методов квантово-химических расчетов в супрамолекулярной химии	11	1	0	1	10
Аттестация	36				
КСР	2				2
Итого	144	18	0	20	88

Содержание разделов и тем дисциплины

Тема 1. Становление современной супрамолекулярной химии

Определение супрамолекулярной химии. Начало современной супрамолекулярной химии – нобелевская премия по химии 1987 года. Ключевые открытия в области супрамолекулярной химии. Нобелевские

лауреаты получившие премию за открытия в области супрамолекулярной химии. Введение понятия "супрамолекулярная химия".

Тема 2. Основные понятия и определения супрамолекулярной химии. Виды межмолекулярных взаимодействий.

Классификация супрамолекулярных соединений хозяин-гость. Рецепторы, координация и аналогия «замок-ключ». Хелатный и макроциклический эффекты. Предорганизация и комплементарность. Термодинамическая и кинетическая селективность. Природа супрамолекулярных взаимодействий. Ион-ионные взаимодействия. Ион-дипольные взаимодействия. Диполь-дипольные взаимодействия. Водородная связь. Катион-я-взаимодействия. Стэкинг- взаимодействия. Силы Ван-дер-Ваальса. Плотная упаковка в твердом состоянии. Гидрофобные эффекты. Супрамолекулярное конструирование хозяина.

Тема 3. Супрамолекулярная химия в живой природе

Катионы щелочных металлов в биохимии. Порфириновые и тетрапиррольные макроциклы. Супрамолекулярные особенности фотосинтеза. Кофермент В12. Нейротрансмиттеры и гормоны. ДНК. Биохимическая самосборка.

Тема 4. Связывание катионов в супрамолекулярной химии.

Краун-эфиры. Лариат-эфиры и поданды. Криптан-ды. Сферанды. Поведение растворов. Селективность катионного комплексообразования. Макроциклический, макробициклический и темплатный эффекты. Предорганизация и комплементарность. Мягкие лиганды для мягких ионов металлов. Образование комплексов с органическими катионами. Алка-лиды и электриды. Каликсарены. Углеродные донорные и л-кислотные лиганды. Сидерофоры.

Тема 5. Связывание анионов в супрамолекулярной химии.

Биологические рецепторы анионов. Концепции конструирования хозяина для анионов. От катионных хозяев к анионным. Рецепторы на основе гуанидиния. Металлоорганические рецепторы. Нейтральные рецепторы. Гидридная губка и другие льюисовские кислотные хелаты. Антикрауны. Координационные взаимодействия.

Тема 6. Связывание нейтральных молекул в супрамолекулярной химии.

Неорганические твердофазные клатратные соединения. Твердые клатраты органических хозяев. Внутривещные комплексы нейтральных молекул: связывание в растворе и в твердом состоянии. Супрамолекулярная химия фуллеренов.

Тема 7. Инженерия кристаллов.

Общие вопросы. Предсказание структуры кристаллов. Кембриджский банк структурных данных. Инженерия кристаллов с алмазоподобными решетками. Инженерия кристаллов с водородными связями. Водородные связи монооксида углерода. Слабые водородные связи. Водородные связи с металлами и гидридами металлов. Стэкинг-взаимодействия. Прочие взаимодействия. «Неправильные» формы и «неправильный» подбор. Координационные полимеры. Биомиметические (биоимитаторные) структуры. Смешанные кристаллы: включения типа «песочные часы».

Тема 8. Темплаты и сборка.

Биохимическая самосборка. Самосборка в синтетических системах: кинетический и термодинамический подходы. Самосборка координационных соединений. Самосборка закрытых комплексов. Катенаны и ротаксаны. Геликаты. Молекулярные узлы.

Тема 9. Молекулярные устройства.

Супрамолекулярная фотохимия. Информация и сигналы: семиохимия. Молекулярные электронные устройства: переключатели, провода и выпрямители. Молекулярные машины. Материалы для нелинейной оптики. Дендримеры.

Тема 10. Биомиметика.

Характеристики ферментов. Циклодекстрины как имитаторы ферментов. Коранды как имитаторы АТФаз. Хозяева, связывающие катионы, как имитаторы трансацилаз. Металлобиоцентры. Аналоги гема. Модели витамина В12.

Тема 11. Жидкие поверхности раздела, жидкие кристаллы и клатраты.

Порядок в жидкостях. Жидкие кристаллы. Жидкие клатраты.

Тема 12. Супрамолекулярное взаимодействие и катализ. Супрамолекулярный металлокатализ. Супрамолекулярный катализ. Супрамолекулярное взаимодействие и катализ. Катализ активными рецепторами катионов. Взаимодействие молекул-рецепторов с анионами. Катализ рецепторами типа циклофанов. Супрамолекулярный металлокатализ. Сокатализ: катализ синтетических реакций. Биомолекулярный и супрамолекулярный катализ.

Тема 13. Применение современных программных пакетов для анализа кристаллических

Программный пакет Mercury для анализа и визуализации трехмерных структур.

Тема 14. Применение современных методов квантово-химических расчетов в супрамолекулярной химии

Программный комплекс HyperChem для выполнения квантово-химических расчетов. Программный комплекс GAUSSIAN комплекс для выполнения квантово-химических расчетов. Программный пакет ChemCraft для визуализации квантово-химических расчетов.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

1. Акимова, Т. И. Основы супрамолекулярной химии : учебное пособие. В двух частях. Часть 1 / Т.И. Акимова ; Дальневосточный федеральный университет. – Владивосток : Издательство Дальневосточного федерального университета, 2021. – [147 с.]. – ISBN 987-5-7444-5239-1. – URL: <https://www.dvfu.ru/upload/medialibrary/741/8ry70uaptnvg078xs2a2urytns25q9hm/Акимова%20Т.И.%20Основы%20супрамолекулярной%20химии%20.pdf>
2. Порозова С.Е. Введение в супрамолекулярную химию – Пермь: Изд-во Перм. нац. исслед. политехн. ун-та, 2012. – 124 с. <https://studfile.net/preview/16728110/>

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Доклад-презентация) для оценки сформированности компетенции ОПК-1:

Подготовить доклад-презентацию, связанную с дизайном одного из выбранных типов супрамолекулярных систем. В докладе должны быть освещены следующие пункты: 1. Для чего создается данная супрамолекулярная система 2. Как производился выбор компонентов системы (рецептор, субстрат). 3. За счет каких взаимодействий будут формироваться связывание в системе. 4. Вид вероятного взаимного расположения субстрат-рецептор. 5. Обосновать на примере термодинамических величин устойчивость системы. 6. Показать примеры возможного влияния кислотно-основных свойств среды на возможность формирования и устойчивость химической системы. 7. Возможности компьютерного моделирования при подготовке синтеза данной системы (виды используемого моделирования, принцип построения компьютерной модели и этапы ее построения, среда моделирования, вычисления).

5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Доклад-презентация) для оценки сформированности компетенции ОПК-2:

Подготовить доклад-презентацию, связанную с анализом реальной химической системы, содержащей супрамолекулярное связывание катиона или аниона при помощи программного продукта Mercury на основе файла данных выданного преподавателем. В презентации должны быть освещены следующие пункты: 1. Виды наглядно демонстрирующие пространственное строение рецепторов и субстрата. 2. На субстрате или рецепторе продемонстрировать владение различными графическими формами отображения трехмерных структур. 3. Показать все типы межмолекулярных взаимодействий, которые образуются в супрамолекулярной системе. 4. Определить типы межмолекулярных взаимодействий и оценить энергию стабилизации супрамолекулярной системы. 5. Показать виды кристаллической упаковки в супрамолекулярной системе вдоль кристаллографических осей.

Критерии оценивания (оценочное средство - Доклад-презентация)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже "превосходно" Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «отлично» Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «очень хорошо» Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «хорошо» Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно», ни одна из компетенций не сформирована на уровне «плохо» Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатор достижения компетенций)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено		зачтено				
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний	Уровень знаний ниже	Минимально	Уровень знаний в	Уровень знаний в	Уровень знаний в	Уровень знаний в

	теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	минимальных требований. Имели место грубые ошибки	допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»

не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ОПК-1

- 1 Определение супрамолекулярной химии
- 2 Классификация супрамолекулярных соединений «хозяин-гость»
- 3 Хелатный эффект
- 4 Макроциклический эффект
- 5 Темплатный эффект
- 6 Предорганизация и комплементарность
- 7 Термодинамическая и кинетическая селективность при образовании супрамолекулярных и комплексных соединений
- 8 Природа супрамолекулярных взаимодействий. Ион-ионные взаимодействия
- 9 Природа супрамолекулярных взаимодействий. Ион-дипольные взаимодействия
- 10 Природа супрамолекулярных взаимодействий. Диполь-дипольные взаимодействия
- 11 Природа супрамолекулярных взаимодействий. Водородная связь
- 12 Природа супрамолекулярных взаимодействий. Катион-π- взаимодействия
- 13 Природа супрамолекулярных взаимодействий. π-π-Стэкинг взаимодействия
- 14 Природа супрамолекулярных взаимодействий. Силы Ван-дер-Ваальса
- 15 Супрамолекулярные особенности фотосинтеза в растениях
- 16 Связывание и транспорт кислорода гемоглобином
- 17 Структура и функции ДНК
- 18 Краун-эфиры
- 19 Поданды, строение, особенности синтеза, практическая значимость
- 20 Лариат-эфиры
- 21 Крипанды, строение, особенности синтеза, практическая значимость
- 22 Сферанды, строение, особенности синтеза, практическая значимость

23 «Жестко-мягкое» взаимодействие

24 Координационные взаимодействия

25 Супрамолекулярная химия фуллеренов

26 Жидкие кристаллы. Природа и структура

5.3.2 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ОПК-2

1. Возможности и предназначение программного пакета ChemCraft
2. Возможности и предназначение программного продукта Mercury
3. Возможности и предназначение программный комплекс Topos Pro
4. Возможности и предназначение программный комплекс HyperChem
5. Возможности и предназначение программный комплекс GAUSSIAN
6. Банки данных кристаллических структур

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов. Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач.
отлично	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок. Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественным недочетами, выполнены все задания в полном объеме. Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.
очень хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.
хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.
удовлетворительно	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок. Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме. Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами.
неудовлетворительно	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы основные

Оценка	Критерии оценивания
	умения и базовые навыки.
плохо	Отсутствие знаний теоретического материала. Отсутствие минимальных умений. Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие знаний, умений и навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Стив Джонатан В. Супрамолекулярная химия = Supramolecular Chemistry : в 2 т. / пер. с англ. И. Г. Варшавской [и др.] ; под ред. А. Ю. Цивадзе, В. В. Арсланова, А. Д. Гарновского. - М. : Академкнига, 2007-. Супрамолекулярная химия . Т. 1. - 2007. - 480 с. : ил. - Предм. указ.: с. 444 - 479. - ISBN 978-5-94628-305-2 (т. 1) : 145.00., 2 экз.
2. Стив Джонатан В. Супрамолекулярная химия = Supramolecular Chemistry : в 2 т. / пер. с англ. И. Г. Варшавской [и др.] ; под ред. А. Ю. Цивадзе, В. В. Арсланова, А. Д. Гарновского. - М. : Академкнига, 2007-. Супрамолекулярная химия . Т. 2. - 2007. - 416 с. - Предм. указ.: с. 847 - 882. - ISBN 978-5-94628-307-6 (т. 2) : 123.00., 2 экз.

Дополнительная литература:

1. Фенелонов Владимир Борисович. Введение в физическую химию формирования супрамолекулярной структуры адсорбентов и катализаторов / отв. ред. В. Н. Пармон ; РАН, Сиб. отд-ние, Ин-т катализа им. Г. К. Борескова. - Новосибирск : Изд-во СО РАН, 2002. - 414 с. - ISBN 5-7692-0562-8 : 45.00., 2 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

Программный пакет ChemCraft для визуализации квантово-химических расчетов

<https://www.chemcraftprog.com/>;

Программный пакет Mercury для анализа и визуализации трехмерных структур

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/Community/csd-community/freemercury/>;

Программный комплекс Topos Pro для анализа и визуализации трехмерных кристаллических структур <https://topospro.com/>;

Программный комплекс HyperChem для выполнения квантово-химических расчетов

<http://www.hypercubeusa.com/>;

Программный комплекс GAUSSIAN комплекс для выполнения квантово-химических расчетов <https://gaussian.com/>;

Сайт Кембриджского банка данных CCDC - <http://www.ccdc.cam.ac.uk>;

База данных трехмерных структур неорганических соединений ICSD <https://icsd.fiz-karlsruhe.de/>;

База данных трехмерных структур макромолекулярных соединений PDB <https://www.rcsb.org/>;

Реферативно-библиографическая база данных Scopus (Elsevier);

Реферативно-библиографическая база данных Scifinder (Chemical Abstracts Service);

Библиометрическая база данных Web of Science Core Collection (Thomson Reuters Scientific LLC.);
Электронная библиотека диссертаций Российской государственной библиотеки (ЭБД РГБ);
Электронные ресурсы российской научной библиотеки eLibrary.ru;
Электронные ресурсы издательства American Chemical Society (ACS);
Электронные ресурсы издательства Royal Society of Chemistry (RSC);
Электронные ресурсы других издательств.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ по направлению подготовки/специальности 04.04.01 - Химия.

Автор(ы): Пискунов Александр Владимирович, доктор химических наук.

Рецензент(ы): Арсеньев Максим Вячеславович, кандидат химических наук.

Заведующий кафедрой: Федоров Алексей Юрьевич, доктор химических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 28.09.2023 г, протокол № 1.