

Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Донецкий государственный университет»

Химический факультет  
Кафедра физической химии



П.А. Машаров

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**«КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»**

Укрупненная группа направлений подготовки	04.00.00 Химия
Программа высшего образования	Программа магистратуры
Направление подготовки	04.04.01 Химия
Магистерская программа	Химия
Квалификация	Магистр
Форма обучения	Очная, очно-заочная

Рабочая программа адаптирована для лиц  
с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

Донецк 2024

Рабочая программа дисциплины «**Квантовая химия**» для обучающихся по направлению подготовки 04.04.01 Химия (Магистерская программа: Химия), составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 13 июля 2017 г. № 655 (с изм. и доп.), Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06 апреля 2021 г. № 245 (с изм. и доп.), в соответствии с учебным планом, утвержденным Ученым советом ФГБОУ ВО «ДонГУ» для набора 2024 года.

Разработчик:

Доцент кафедры физической химии,  
канд. хим. наук, доцент



Н.А. Туровский

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры физической химии  
Протокол от 26.03.2024 г. № 14

Заведующий кафедрой



В.М. Михальчук

СОГЛАСОВАНО:

Декан химического факультета  
28.03.2024 г.



С.Г. Бахтин

Учебно-методическая комиссия химического факультета  
Протокол от 27.03.2024 г. № 2  
Председатель



Р.И. Лыга

Руководитель основной профессиональной  
образовательной программы,  
д-р хим. наук, проф.  
28.03.2024 г.



А.С. Алемасова

## 1. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

1.1. Требования к предварительной подготовке обучающихся, предшествующие и сопутствующие дисциплины, на которых основывается изучение данной:

дисциплины программы бакалавриата: «физическая химия», «органическая химия», «квантовая химия», «строение вещества», а также сопутствующих дисциплин - «Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода», «супрамолекулярная химия», «компьютерная структурная химия».

1.2. Дисциплины, курсовые работы и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее:

ознакомительная практика, педагогическая практика, научно-исследовательская работа, преддипломная практика.

## 2. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 2.1. Общая характеристика

Наименование показателя	Значение показателя
Название образовательной программы	04.04.01 Химия (Магистерская программа: Химия)
Шифр и название в соответствии с учебным планом	Б1.В.ДВ.2.1 Квантовая химия
Часть образовательной программы	Вариативная часть (Дисциплина по выбору).
Количество зачетных единиц / всего часов	3/108

### 2.2. Распределение часов по периодам обучения

Форма обучения	курс	семестр	Общее количество часов					Форма контроля
			лекционных	лабораторных	практических	самостоятельной работы+контроль	всего	
Очная	1	3	13	13	-	82	108	зачет
Очно-заочная	1	2	2	2	-	104	108	зачет

## 3. ЦЕЛИ ДИСЦИПЛИНЫ

Формирование у магистров методологической и научной культуры, систематических знаний современного состояния, возможностей и ограничений современной квантовой химии; дать в руки химикам - экспериментаторам инструмент исследования, который разрешил бы проводить квантово-химические исследования с использованием всех возможностей современных компьютерных технологий и научить их мыслить структурными категориями в химии.

## 4. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ КОМПОНЕНТА ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ, ИХ ИНДИКАТОРЫ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Компетенции	Индикаторы	Результаты обучения
ОПК-2. Способен анализировать, ин-	<b>ОПК-2.1.</b> Проводит критический анализ ре-	<b>Знает</b> основные научные результаты, полученные отечественными и зарубеж-

терпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их.	ными исследователями в области химии или смежных наук <b>Умеет</b> формулировать заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук
--	--	---

## 5. ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Название темы	Краткое содержание темы (вопросы темы)
Раздел 1. Актуальные направления современной квантовой химии.	<p>Концептуальные основы, состояние и проблемы современной квантовой химии.</p> <p>Квантовая биохимия.</p> <p>Квантовая нанохимия.</p> <p>Квантовая медицинская химия.</p> <p>Квантовая экологическая химия,</p> <p>Квантовая супрамолекулярная химия.</p> <p>Квантовая химия твердого тела.</p> <p>Сканирующая зондовая микроскопия как инструмент квантовой химии.</p> <p>Зондовая туннельная микроскопия.</p> <p>Магнитно-силовая микроскопия.</p> <p>Электросиловая микроскопия.</p>
Раздел 2. Состояние, возможности и ограничения современных компьютерных технологий квантовой химии.	<p>Методология компьютерных технологий неэмпирической квантовой химии.</p> <p>Методология компьютерных технологий полуэмпирической квантовой химии.: AM1, RM1. PM3, PM6, PDDG приближения.</p> <p>Методология компьютерных технологий DFT квантовой химии.</p> <p>Орбитали Хартри — Фока.</p> <p>Орбитали Слейтера - Зенера.</p> <p>Базисные функции для неэмпирических расчетов.</p> <p>Орбитали гаусового типа.</p> <p>Одноэкспоненциальная орбиталь слэтеровского типа.</p> <p>Минимальные базисные наборы.</p> <p>Двухэкспоненциальные базисные наборы.</p> <p>Расширенные базисные наборы.</p> <p>Поляризационные и диффузные функции.</p> <p>Источники погрешности ССП МО ЛКАО расчетов.</p> <p>Общий подход к учету энергии электронной корреляции. Комбинированные квантово-классические приближения (QM/MM).</p>
Раздел 3. Концептуальные основы, состояние и проблемы	Орбитально-электростатическая концепция теории химической связи..

теории химической связи.	<p>Основные представления орбитальной картины химической связи.</p> <p>Принцип орбитального соответствия. АО (методика Малликена).</p> <p>Энергия двухатомных взаимодействий (<math>E_{AB}</math>) в приближении Малликена: резонансные и обменные двухатомные взаимодействия, электростатические двухатомные взаимодействия.</p> <p>*араметры критических точек электронной плотности, характеризующие химическую связь.</p> <p>Тип критической точки электронной плотности в межъядерном пространстве химической связи.</p> <p>Концепция сил в теории химической связи: теорема Гельмана-Фейнмана, природа химической связи в приближении электростатической теоремы Гельмана – Фейнмана.</p> <p>Теорема вириала, природа химической связи в приближении теоремы вириала.</p>
Раздел 4. Методология квантово-химического моделирования химических реакций.	<p>Элементарный акт химической реакции.</p> <p>Теория переходного состояния химической реакции.</p> <p>Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции.</p> <p>Стационарные точки ППЭ элементарной реакции.</p> <p>Путь химической реакции.</p> <p>Оценка геометрии переходного состояния химической реакции.</p> <p>Индексы реакционной способности.. Квантовая термодинамика.</p> <p>Метод изодесмических реакций.</p> <p>Определение термодинамических характеристик химических частиц и энергии их диссоциации на ионы и радикалы в приближении изодесмических реакций. Неизодесмические реакции.</p>
Раздел 5. Методология квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов.	<p>PCM континуальные модели и супермолекулярное приближение квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов.</p> <p>Континуальная модель поляризационного действия. .</p> <p>Моделирование сольватных оболочек растворителя COSMO.</p> <p>Энергия и градиенты энергии диэлектрического экранирования растворителем молекул вещества.</p> <p>Полная энергия сольватированных молекулярных систем.</p> <p>Возможности и ограничение модели COSMO.; Методика квантовохимического моделирования действия среды на химические объекты в приближении модели COSMO.</p> <p>Эффекты поляризационного действия растворителя на параметры электронной структуры химических частиц.</p>

## 6. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 6.1. Форма обучения – очная, курс –1, семестр – 2

Наименования разделов и тем	Количество часов				
	Лекц.	Лабор.	Практ.	СРС+К	Всего
Раздел 1. Актуальные направления современной квантовой химии.	3	2	-	15	21
Раздел 2. Состояние, возможности и ограничения современных компьютерных технологий квантовой химии.	3	2	-	15	21
Раздел 3. Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи.	3	3	-	16	23
Раздел 4. Методология квантово-химического моделирования химических реакций.	3	3	-	16	23
Раздел 5. Методология квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химич.еагентов.	3	3	-	16	23
ИТОГО ПО КОМПОНЕНТУ ОПОП	13	13	-	82	108

### 6.2. Форма обучения – очно-заочная, курс – 1, семестр – 2

Наименования разделов и тем	Количество часов				
	Лекц.	Лабор.	Практ.	СРС+К	Всего
Раздел 1. Актуальные направления современной квантовой химии.	-	-	-	20	20
Раздел 2. Состояние, возможности и ограничения современных компьютерных технологий квантовой химии.	0.5	05	-	21	22
Раздел 3. Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи.	0.5	05	-	21	22
Раздел 4. Методология квантово-химического моделирования химических реакций.	0.5	05	-	21	22
Раздел 5. Методология квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химич.еагентов.	0.5	05	-	21	22
ИТОГО ПО КОМПОНЕНТУ ОПОП	2	2	-	104	108

## 7. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ (СРЕДСТВА) ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

### 7.1. Контрольные вопросы

#### Раздел 1

- 1 Концептуальные основы, состояние и проблемы современной квантовой химии.
- 2 Квантовая биохимия.
- 3 Квантовая нанохимия.
- 4 Квантовая медицинская химия.
- 5 Квантовая экологическая химия,
- 6 Квантовая супрамолекулярная химия.

- 7 Квантовая химия твердого тела.
- 8 Сканирующая зондовая микроскопия как инструмент квантовой химии.
- 9 Зондовая туннельная микроскопия.
- 10 Магнитно-силовая микроскопия.
- 11 Электросиловая микроскопия.
- Раздел 2.
- 12 Методология компьютерных технологий неэмпирической квантовой химии.
- 13 Методология компьютерных технологий полуэмпирической квантовой химии.: AM1, RM1, PM3, PM6, PDDG приближения.
- 14 Методология компьютерных технологий DFT квантовой химии.
- 15 Орбитали Хартри — Фока.
- 16 Орбитали Слейтера - Зенера.
- 17 Базисные функции для неэмпирических расчетов.
- 18 Орбитали гаусового типа.
- 19 Одноэкспоненциальная орбиталь слэтеровского типа.
- 20 Минимальные базисные наборы.
- 21 Двухэкспоненциальные базисные наборы.
- 22 Расширенные базисные наборы.
- 23 Поляризационные и диффузные функции.
- 24 Источники погрешности ССП МО ЛКАО расчетов.
- 25 Общий подход к учету энергии электронной корреляции.
- 26 Комбинированные квантово-классические приближения (QM/MM).
- Раздел 3.
- 27 Орбитально-электростатическая концепция теории химической связи..
- 28 Основные представления орбитальной картины химической связи.
- 29 Принцип орбитального соответствия. АО (методика Малликена).
- 30 Энергия двухатомных взаимодействий ( $E_{AB}$ ) в приближении Малликена: резонансные и обменные двухатомные взаимодействия, электростатические двухатомные взаимодействия.
- 31 Тип критической точки электронной плотности в межъядерном пространстве химической связи.
- 32 Концепция сил в теории химической связи: теорема Гельмана-Фейнмана, природа химической связи в приближении электростатической теоремы Гельмана – Фейнмана.
- 33 Теорема вириала, природа химической связи в приближении теоремы вириала.
- Раздел 4
- 34 Элементарный акт химической реакции.
- 35 Теория переходного состояния химической реакции. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции.
- 36 Стационарные точки ППЭ элементарной реакции. Путь химической реакции.
- 37 Оценка геометрии переходного состояния химической реакции.
- 38 Индексы реакционной способности.. Квантовая термохимия.
- 39 Метод изодесмических реакций.
- 40 Определение термохимических характеристик химических частиц и энергии их диссоциации на ионы и радикалы в приближении изодесмических реакций. Неизодесмические реакции.
- Раздел 5
- 41 Время в физической химии: кинетика и динамика.
- 42 РСМ континуальные модели и супермолекулярное приближение квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов.

- 43 Континуальная модель поляризационного действия. . Моделирование сольватных оболочек растворителя COSMO.
- 44 Энергия и градиенты энергии диэлектрического экранирования растворителем молекул вещества. Полная энергия сольватированных молекулярных систем.
- 45 Возможности и ограничение модели COSMO.;
- 46 Методика квантовохимического моделирования действия среды на химические объекты в приближении модели COSMO.
- 47 Эффекты поляризационного действия растворителя на параметры электронной структуры химических частиц.

### 7.3. Вопросы письменной контрольной работы

- 1 Концептуальные основы, состояние и проблемы современной квантовой химии.
- 2 Задачи квантовой биохимии.
- 3 Задачи квантовой нанохимии
- 4 задачи квантовой медицинской химии..
- 5 Задачи квантовой экологической химии.,
- 6 Задачи квантовой супрамолекулярной химии.
- 7 Магнитно-силовая микроскопия.
- 8 Электросиловая микроскопия.
- 9 Методология компьютерных технологий неэмпирической квантовой химии.
- 10 Орбитали Хартри — Фока.
- 11 Орбитали Слейтера - Зенера.
- 12 Базисные функции для неэмпирических расчетов.
- 13 Орбитали гаусового типа.
- 14 Одноэкспоненциальная орбиталь слэтеровского типа.
- 15 Минимальные базисные наборы.
- 16 Двухэкспоненциальные базисные наборы.
- 17 Расширенные базисные наборы.
- 18 Поляризационные и диффузные функции.
- 19 Источники погрешности ССП МО ЛКАО расчетов.
- 20 Общий подход к учету энергии электронной корреляции.
- 21 Комбинированные квантово-классические приближения (QM/MM).
- 22 Орбитально-электростатическая концепция теории химической связи..
- 23 Основные представления орбитальной картины химической связи.
- 24 Принцип орбитального соответствия. АО (методика Малликена).
- 25 \*араметры критических точек электронной плотности, характеризующие химическую связь.
- 26 Концепция сил в теории химической связи: теорема Гельмана-Фейнмана, природа химической связи в приближении электростатической теоремы Гельмана – Фейнмана.
- 27 Теорема вириала, природа химической связи в приближении теоремы вириала.
- 28 Элементарный акт химической реакции.
- 29 Теория переходного состояния химической реакции. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции.
- 30 Стационарные точки ППЭ элементарной реакции. Путь химической реакции.
- 31 Оценка геометрии переходного состояния химической реакции.
- 32 Индексы реакционной способности.. Квантовая термехимия.
- 33 Метод изодесмических реакций.
- 34 Определение термехимических характеристик химических частиц и энергии их диссоциации на ионы и радикалы в приближении изодесмических реакций. Неизодесмические реакции.
- 35 Время в физической химии: кинетика и динамика.



- 36 РСМ континуальные модели и супермолекулярное приближение квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов.
- 37 Континуальная модель поляризационного действия. . Моделирование сольватных оболочек растворителя COSMO.
- 38 Энергия и градиенты энергии диэлектрического экранирования растворителем молекул вещества. Полная энергия сольватированных молекулярных систем.
- 39 Эффекты поляризационного действия растворителя на параметры электронной структуры химических частиц.

7.4. Образец содержания экзаменационного билета (при наличии экзамена по дисциплине)

Билет 1

1. Квантовая нанохимия.
2. Квантовая медицинская химия.
3. Квантовая экологическая химия,

## 8. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БАЛЛОВ, КОТОРЫЕ ПОЛУЧАЮТ ОБУЧАЮЩИЕСЯ

Общая оценка знаний обучающихся по дисциплине проводится по 100-балльной шкале исходя из максимума, приведенного в таблице ниже. Организационно-учебная работа в аудитории оценивается на основе таких критериев как посещаемость занятий, своевременное и качественное выполнение домашних заданий, активность во время проведения лекционных и практических занятий (участие в обсуждении текущего и пройденного материала, решение задач и т.п.).

### 8.1. Семестр 2, очная форма обучения

Номера разделов	Виды работ	Максимальное количество баллов
1-5	Организационно-учебная работа в аудитории	20
	Самостоятельная работа	20
	Контрольная работа	10
ИТОГО		50
Экзамен		50
Общий итог за семестр		100

### 8.2. Семестр 2, очно-заочная форма обучения

Номера разделов	Виды работ	Максимальное количество баллов
1-5	Организационно-учебная работа в аудитории	30
	Самостоятельная работа	20
	Контрольная работа	10
ИТОГО		50

Экзамен	50
Общий итог за семестр	100

## Соответствие баллов оценке

Количество баллов из 100	ECTS	Оценка по пятибалльной шкале	
		Экзамен, дифференцированный зачет	Зачет
90-100	A	отлично	зачтено
80-89	B	хорошо	зачтено
75-79	C		зачтено
70-74	D	удовлетворительно	зачтено
60-69	E		зачтено
35-59	FX	неудовлетворительно	не зачтено
0-34	F		не зачтено

## 9. ОБЕСПЕЧЕНИЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ И ИНВАЛИДОВ

В ходе реализации дисциплины используются следующие дополнительные методы обучения, текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в зависимости от их индивидуальных особенностей:

- 1) для слепых и слабовидящих:
  - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
  - для выполнения задания при необходимости предоставляется увеличивающее устройство; возможно также использование собственных увеличивающих устройств;
  - письменные задания оформляются увеличенным шрифтом.
- 2) для глухих и слабослышащих:
  - лекции оформляются в виде электронного документа;
  - письменные задания выполняются на компьютере в письменной форме;
  - экзамен проводится в письменной форме на компьютере; возможно проведение в форме тестирования.
- 3) для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
  - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
  - письменные задания выполняются на компьютере;
  - экзамен и зачёт проводятся в устной форме или выполняются в письменной форме на компьютере.

При необходимости предусматривается увеличение времени для подготовки ответа.

Процедура проведения промежуточной аттестации для обучающихся устанавливается с учётом их индивидуальных психофизических особенностей. Промежуточная аттестация может проводиться в несколько этапов.

Проведение процедуры оценивания результатов обучения допускается с использованием дистанционных образовательных технологий.

Обеспечивается доступ к информационным и библиографическим ресурсам в сети Интернет для каждого обучающегося в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

- 1) для слепых и слабовидящих:
  - в печатной форме увеличенным шрифтом;
  - в форме электронного документа;
- 2) для глухих и слабослышащих:

- в печатной форме;
- в форме электронного документа.
- 3) для обучающихся с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
  - в печатной форме;
  - в форме электронного документа.

## 10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Учебные занятия проводятся в IX учебном корпусе ДонГУ (г. Донецк, ул. Щорса, 17а). Для проведения лекционных и практических занятий требуется аудитория, оборудованная меловой или маркерной доской, мультимедийный проектор и экран, ноутбук, комплект учебной мебели для студентов, рабочее место преподавателя, выход в Интернет – проводной или с использованием Wi-Fi.

Для самостоятельной работы используются текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета и других электронных библиотечных баз данных, учебно-методическое обеспечение, представленное в учебно-методическом кабинете Главного корпуса (ауд.405).

При изучении дисциплины применяются электронное обучение и дистанционные образовательные технологии.

С использованием ресурсов дистанционного образования осуществляется текущий контроль знаний обучающихся на основе тестирования и проверки результатов самостоятельной работы.

## 11. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

### 11.1. Основная литература

- 1 Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по хим.-технол. направлениям и специальностям / В.Г. Цирельсон. – Москва: БИНОМ. Лаб. знаний, 2010. – 495 с. Текст: непосредственный.
- 2 Туровский Н.А. Практикум по квантовой химии: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2019. – 145 с. Текст: непосредственный.
- 3 Туровский Н.А. Практикум по квантовой химии [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с. Текст: электронный..
- 4 Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с. Текст: непосредственный.
- 5 Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с. Текст: электронный.

### 11.2. Дополнительная литература

- 6 Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности ВПО 020101.65 "Химия" / А.И. Ермаков. – Москва: Юрайт, 2010. – 555 с. Текст: непосредственный.
- 7 Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул / И. Майер ; пер. с англ. М.Б. Дарховского и А.М. Токмачева ; под ред. А.Л. Чугреева. – Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 384 с. Текст: непосредственный.

- 8 Стрижак, П.Е. Квантовая химия: учебник для студ. выс. учебн. завед. / П.Е. Стрижак; Национальный ун-т "Киево-Могилянская акад.". – Киев: Изд. дом "Киево-Могилянская акад.", 2009. – 458 с. Текст: непосредственный.
- 9 Гришаева Т. Н. Квантовая химия супрамолекулярных систем на основе кукурбит[п]урилов [Текст] / Т. Н. Гришаева, А.Н. Масой, А.М. Кузнецов. – Москва: [Ленанд](#), 2016. – 208 с. Текст: непосредственный.
- 10 Пастернак, Е. Н. Основы квантовой химии: учебное пособие. / Е.Н. Пастернак, Н.А. Туровский ; Донецкий нац. ун-т, хим. ф-т, каф. физ. химии. – Донецк: ДонНУ, 2012. – 81 с. Текст: непосредственный.

1

## 12. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. Информиио : электрон. справочник / ООО «РИНФИЦ». – Москва : Издат. дом «Информиио», [2018?– ]. – URL: <https://www.informio.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Текст : электронный.
2. IPR SMART : весь контент ЭБС Ipr books : цифровой образоват. ресурс / ООО «Ай Пи Эр Медиа». – [Саратов : Ай Пи Эр Медиа, 2022]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Режим доступа: для авториз. пользователей. – Текст. Аудио. Изображения : электронные.
3. Лань : электрон.-библ. система. – Санкт-Петербург : Лань, сор. 2011–2021. – URL: <https://e.lanbook.com/> (дата обращения: 19.05.2023). – Текст : электронный. – Режим доступа: для авторизир. пользователей.
4. СЭБ : Консорциум сетевых электрон. б-к / Электрон.-библ. система «Лань» при поддержке Агентства стратег. инициатив. – Санкт-Петербург : Лань, сор. 2011–2021. – URL: <https://seb.e.lanbook.com/> (дата обращения: 19.05.2023). – Режим доступа : для пользователей организаций – участников, подписчиков ЭБС «Лань».
5. Book on lime : дистанц. образование / изд-во КДУ МГУ им. М. В. Ломоносова. – Москва : КДУ, сор. 2017. – URL: <https://bookonlime.ru> (дата обращения: 19.05.2023) – Текст . Изображение. Устная речь : электронные.
6. Научная электронная библиотека elibrary.ru : информ.-аналит. портал / ООО Научная электронная библиотека. – Москва : ООО Науч. электрон. б-ка, сор. 2000–2022. – URL: <https://elibrary.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.
7. Cyberleninka : науч. электрон. б-ка «КиберЛенинка» / [Е. Кисляк, Д. Семячкин, М. Сергеев ; ООО «Итеос»]. – Москва : КиберЛенинка, 2012. – URL: <http://cyberleninka.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Текст : электронный.
8. Электронный каталог Научной библиотеки Донецкого государственного университета. – Донецк : НБ ДонГУ, 1999– . – URL: <http://catalog.donnu.education> (дата обращения: 01.01.2023). – Текст : электронный.

## 13. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонГУ № 46484614)
2. Microsoft Office (корпоративная л и ДонГУ № 46472919)
3. Microsoft Visual Studio (лицензия ммы Dream Spark для высших учебных заведений)

4. Антивирус Касперского, Adobe Acrobat Reader, xPDF (лицензии GPL, Apache, BSD для свободного программного обеспечения).