

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**ФГАОУ ВО "Новосибирский национальный  
исследовательский государственный университет"**

**Факультет естественных наук**



**УТВЕРЖДАЮ**

**Декан ФЕН НГУ, профессор**

**Резников В.А.**

**«29» августа 2014 г.**

**Молекулярный дизайн  
катализаторов**

**Модульная программа лекционного курса,  
семинаров, практикума и самостоятельной работы  
студентов**

**Курс 2–й, III семестр**

**Учебно-методический комплекс**

**Новосибирск 2014**

Учебно-методический комплекс предназначен для студентов 2 курса факультета естественных наук, направление подготовки 020100 «Химия (магистр)». В состав пособия включены: программа и структура курса, система оценки знаний студента, перечень заданий для компьютерного курса, учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины, рекомендованная литература для изучения дисциплины. Кроме того, приведен набор вопросов для самостоятельной работы студентов с использованием современной научной литературы и даны примеры курсовых работ, выполненных студентами в прошлые годы.

Составитель

Кузнецов В.Л., доцент, к.х.н.

© Новосибирский государственный  
университет, 2014

## **Содержание**

<b>Аннотация рабочей программы</b>	<b>4</b>
<b>1. Цели освоения дисциплины</b>	<b>6</b>
<b>2. Место дисциплины в структуре ООП</b>	<b>7</b>
<b>3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины</b>	<b>8</b>
<b>4. Структура и содержание дисциплины</b>	
<b>4.1.Программа курса лекций</b>	<b>10</b>
<b>4.2. Рабочий план (по неделям семестра)</b>	<b>11</b>
<b>4.3. Содержание разделов дисциплины</b>	<b>12</b>
<b>5. Образовательные технологии</b>	<b>14</b>
<b>6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины</b>	<b>15</b>
<b>Домашние задания</b>	<b>17</b>
<b>Литература к практикуму</b>	<b>17</b>
<b>7. Рекомендованная литература к теоретическому курсу</b>	<b>15</b>
<b>8. Материально-техническое обеспечение дисциплины</b>	<b>18</b>

## **Аннотация рабочей программы**

Дисциплина «Молекулярный дизайн катализаторов» относится к вариативной части (профильные дисциплины) профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ» (квалификация (степень) магистр). Дисциплина реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Новосибирский национальный исследовательский государственный университет" (НГУ) кафедрой катализа и адсорбции.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с молекулярным моделированием химических процессов, созданием молекулярных моделей химических систем для наиболее важных типов каталитических процессов, ознакомлением с принципами построения программ молекулярного моделирования на примерах доступных программных комплексов; приобретением навыков работы со структурными базами данных, созданием молекулярных моделей в рамках индивидуальных планов работ магистранта, проведение расчетов свойств химических систем с использованием этих моделей.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника общекультурных компетенций: ОК-5, ОК-6; профессиональных компетенций: ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5, ПК-6.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, семинарские и практические занятия в компьютерном классе, самостоятельную работу студента, подготовку курсовой работы, сдачу зачета,

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль. В ходе семинарских и практических занятий студенты приобретают навыки работы с базами данных, программами молекулярного моделирования и расчета свойств химических систем. Эти навыки закрепляются при выполнении типичных заданий по выделенным темам курса до безусловного достижения необходимых навыков. Итоговый контроль и сдача дифференциального зачета осуществляется в ходе подготовки и защиты курсовой работы, тема которой, как правило, связана с созданием моделей и выполнением расчетов свойств химических систем, исследуемых или используемых магистрантом в ходе работы по теме магистрантской диссертации.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы. Всего 96 академических часов. Программой дисциплины предусмотрены 24 часа лекционных, 8 часов семинарских занятий, 16 часов практических работ в компьютерном классе, а также 16 часов самостоятельной работы студентов, 32 часа подготовки и защиты курсовой работы.

## **1. Цели освоения дисциплины**

Основной целью освоения дисциплины «Молекулярный дизайн катализаторов» является получение знаний, необходимых для создания молекулярных моделей химических объектов с использованием структурных баз данных и программ молекулярного моделирования. Для достижения поставленной цели выделяются следующие задачи курса: ознакомление с основами создания молекулярных моделей химических систем для наиболее важных типов каталитических процессов; ознакомление с принципами построения программ молекулярного моделирования на примерах доступных программных комплексов; приобретение навыков работы со структурными базами данных; создание молекулярных моделей в рамках индивидуальных планов работ магистранта, проведение расчетов свойств химических систем с использованием этих моделей.

На лекциях даются основные представления о программах, используемых для молекулярного моделирования, информационных источниках получения структурных данных (структурных базах данных, библиографических банках данных), о строении основных типов каталитических центров различной природы и основных каталитических процессов, каталитических циклах и подходах построения моделей активных центров катализаторов, методах расчета характеристик катализаторов.

На практических и семинарских занятиях студенты осваивают программы молекулярного моделирования, приобретают навыки получения структурной информации из структурных баз и библиографических данных, учатся строить модели различных типов катализаторов, с использованием специализированных программ получать рентгенограммы модельных соединений, обрабатывать экспериментальные рентгенограммы, проводить расчеты спектральных свойств и термодинамических характеристик химических соединений. Учатся использовать методологию предмета для решения специфических проблем, с которыми обычно сталкиваются специалисты в области приготовления и исследования катализаторов.

## II. Место дисциплины в структуре образовательных программ

Дисциплина «Молекулярный дизайн катализаторов» относится к вариативной части профессионального (специального) цикла ООП, по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ», уровень подготовки – «магистр», преподается во на 2 курсе магистратуры опирается на следующие дисциплины данной ООП:

Физика (квантово-механическое описание вещества, волновая функция, гамильтониан)

Высшая алгебра (матрицы, уравнение на собственные значения и векторы матрицы)

Физическая химия (строение и свойства атома, природа химической связи, химическая реакция, понятия о кинетике и термодинамике реакций, адсорбция и пористая структура, кинетика гетерогенных каталитических реакций, катализ, научные основы приготовления катализаторов, кинетика жидкофазных реакций);

Неорганическая химия и химия координационных соединений (строение неорганических веществ, реакционная способность комплексных соединений, основы кристаллохимии, гетерогенные равновесия, сложные равновесия в растворах, функциональные материалы, кластерные соединения, металлоорганическая химия);

Органическая и биоорганическая химия (физическая химия полимеров, химия природных соединений, теоретические основы органической химии);

Химия твердого тела и химия материалов (кинетика гетерогенных реакций, физико-химическая механика и механохимия, химия поверхности, физические свойства твердых тел, физические методы исследования твердых тел);

Квантово-химические методы в катализе

Основы компьютерной грамотности (навыки обращения с ПК и основными программами, используемыми для представления экспериментальных результатов);

Химия окружающей среды (общая экология).

Результаты освоения дисциплины «Молекулярный дизайн катализаторов» используются для молекулярного моделирования каталитических центров, визуализации химических объектов, а также в следующих дисциплинах данной ООП:

Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе

Магнитная радиоспектроскопия

Адсорбция и пористая структура  
Кинетика гетерогенных каталитических реакций  
Рентгеновские методы в катализе  
Сложные равновесия в растворах  
Функциональные материалы  
Адсорбция и пористая структура

### **3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Молекулярный дизайн катализаторов»:**

#### **• общекультурные компетенции:**

- *владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований (ОК-5);*
- *пониманием принципов работы и умением работать на современных научных приборах и оборудовании при проведении научных исследований (ОК-6);*

#### **• профессиональные компетенции:**

- *наличием представления об актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в критических условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и другие) (ПК-1);*
- *знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК-2);*
- *владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (в соответствии с профильной направленностью магистерской диссертации) (ПК-3);*
- *умением анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой научным*

руководителем теме и самостоятельно составлять план исследования (ПК-4);

- способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения (ПК-5);
- наличием опыта профессионального участия в научных дискуссиях (ПК-6).

**В результате освоения дисциплины обучающийся должен:**

- - иметь представление об основных подходах создания молекулярных моделей в области катализа и выявлении наиболее важных экспериментальных аспектов для построения таких моделей
- - знать основные источники структурной информации, необходимые для построения молекулярных моделей, и принципы организации программ молекулярного моделирования
- - уметь на основании экспериментальных данных, структурных баз данных с использованием программ молекулярного моделирования построить модель адсорбционного и/или активного центра катализатора или модели реагирующих веществ
- - уметь проводить расчеты энергетических или спектральных характеристик построенных моделей или формулировать необходимые требования к расчету их свойств (если это невозможно сделать на имеющихся компьютерах и с имеющимся программным обеспечением).

#### 4. Структура и содержание дисциплины

##### 4.1 Программа курса лекций

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)

				Лекция	Семинарские занятия	Практические занятия	Контр. работа	Коллоквиумы	Домашние задания	Самост. работа	Зачет	Экзамен	
1.1	Общие принципы дизайна (разработки) катализаторов. Принципы молекулярного моделирования	5	1	2					1	2			Домашнее задание
1.2	Математические методы моделирования и исследования строения и свойств химических объектов на примере комплексов программ молекулярного моделирования (HyperChem, ChemOffice)	5	2-3	4	2	6			2	2			Домашнее задание
1.3	Источники структурной информации для молекулярного моделирования, структурные базы данных	5	4-5	4	4	6			4	4			Домашнее задание
1.4	Молекулярное моделирование химических объектов живой природы. Ферменты, биомиметика.	3	6	2	1				2	2			Домашнее задание
1.5	Компоненты молекулярных конструкторов.	5	7-8	4	1	2			2	2			Домашнее задание
1.6	Явления транспорта в химических системах	5	9	2		2			2	2			Домашнее задание
1.7	Методы организации химических систем для проведения каталитических процессов.	5	10-11	4					2	2			Домашнее задание
1.8	Методы приготовления катализаторов на основе иммобилизованных комплексов, элементоорганических соединений, ферментов, клеток	5	12	2					1	1			Домашнее задание
1.9	Курсовая работа по моделированию химических объектов в									30	2		Выполнение курсовой работы

рамках тематики магистрантской (дипломной) работы													
		12	24	8	16			16	30	2			

#### 4.2. Рабочий план (по неделям семестра)

Неделя	Темы занятий
<b>Сентябрь</b>	Место семинара – лекции (учебный класс в Институте катализа СО РАН).
1-я неделя	<b>Лекция 1-2.</b> Общие принципы дизайна (разработки) катализаторов. Принципы молекулярного моделирования.
2-я неделя	<b>Лекция 3.</b> Молекулярная механика <b>Лекция 4.</b> Программы молекулярного моделирования. Визуализация химических объектов, построение 2D и формирование 3D моделей.
3-я неделя	<b>Лекция 5.</b> Комплекс программ HyperChem <b>Лекция 6.</b> Построение моделей кластерных моделей, белков, ДНК, РНК, полимеров
4-я неделя	<b>Лекция 7.</b> Банк данных кристаллических структур неорганических соединений <b>Лекция 8.</b> Рентгеноструктурная база данных – PDF, программы построения рентгенограмм
5-я неделя	<b>Лекция 9.</b> Кембриджский банк структурных данных <b>Лекция 10.</b> Банк данных 3-D структур белков и нуклеиновых кислот.
6-я неделя	<b>Лекция 11-12.</b> Молекулярное моделирование химических объектов живой природы. Биомиметика.
7-я неделя	<b>Лекция 13-14.</b> Компоненты молекулярных конструкторов.
8-я неделя	<b>Лекция 15-16.</b> Явления транспорта в химических системах.
9-я неделя	<b>Лекция 17.</b> Матричный (темплатный) синтез химических объектов с заданными свойствами <b>Лекция 18.</b> Разработка катализаторов с заданными молекулярно-ситовыми свойствами
10-я неделя	<b>Лекция 19-20.</b> Нанотехнологии в катализе
11-я неделя	<b>Лекция 21.</b> Высокоэнергетические методы формирования веществ с заданными свойствами

	<b>Лекция 22.</b> Нетрадиционные способы организации каталитических процессов. Принципы построения каталитических систем с использованием мембранных материалов.
12-я неделя	<b>Лекция 23.</b> Методы приготовления катализаторов на основе иммобилизованных комплексов, ферментов, клеток. <b>Лекция 24.</b> Нанесенные металлорганические катализаторы.
	Практикум (6 занятий по 2 часа, компьютерный класс в Институте катализа СО РАН ).

### 4.3. Содержание разделов дисциплины:

1. Общие принципы дизайна (разработки) катализаторов. Принципы молекулярного моделирования. Примеры разработки катализаторов метанирования, селективного гидрирования, риформинга, селективного и полного окисления и т.п. – классические подходы.

2. Математические методы моделирования и исследования строения и свойств химических объектов на примере комплексов программ молекулярного моделирования (HyperChem, ChemOffice). Визуализация химических объектов, построение 2D и формирование 3D моделей. Молекулярная механика, квантово-химические методы расчета свойств химических объектов. Молекулярная динамика. Моделированию химических объектов (каталитических центров): типовые задачи, решение которых возможно с использованием комплексов программ HyperChem, Gaussian и др. Программа PCW (Powder Cell for Windows)

3. Источники структурной информации для молекулярного моделирования, структурные базы данных.

Inorganic Crystal Structure Database (Fachinformation-szentrum (FIZ) Karlsruhe) Банк данных кристаллических структур неорганических соединений.

Кембриджский банк структурных данных (органические, биоорганические, элементарноорганические и координационные соединения).

Protein Data Bank, PDB — банк данных 3-D структур белков и нуклеиновых кислот.

Рентгеноструктурная база данных - PDF (Powder diffraction Files International Centre for Diffraction Data database).

4. Молекулярное моделирование химических объектов живой природы. Молекулярный дизайн катализаторов живой природой: активные центры ферментов. Комплементарность строения ферментов и переходного активного центра. Полифункциональность активных центров, эффекты микросреды. Строение и механизмы действие наиболее важных ферментов. Биомиметика. Молекулярные пинцеты, ловушки и проч. Химические модели гемоглобина, миоглобина, нитрогеназы, фотосистемы растений.

5. Компоненты молекулярных конструкторов. Молекулярное распознавание, считывание информации, комплементарность активного центра и субстрата, молекулярные рецепторы, матричный синтез, супрамолекулярный катализ, эффекты сближение химических объектов, групп.

6. Явления транспорта в химических системах (рецепторы, мембраны).

А. Транспорт посредством носителей (carrier –mediated transport) аналог физического катализа. Образование комплекса носитель-субстрат на межфазной границе, диффузия комплекса через мембрану, высвобождение субстрата, обратная диффузия свободного носителя, симпорт, антипорт.

Б. Транспорт в трансмембранных каналах. Сопряженные процессы переноса, электрон-сопряженный симпорт, протон-сопряженный перенос в рН-градиенте, фотон сопряженные процессы, электронпроводящие устройства.

В. Явления спилловера (водород, кислород).

Г. Электропроводные молекулярные структуры, туннелирование электронов.

7. Нетрадиционные способы организации каталитических процессов. Принципы построения каталитических систем с использованием мембранных материалов, топливные элементы, фотохимические процессы, жидкости чувствительные к воздействию полей. Высокоэнергетические методы формирования веществ с

заданными свойствами, ультразвуковое разложение веществ, плазменное и высокотемпературное распыление материалов. Темплатный синтез химических объектов с заданными свойствами. Нанотехнологии. Формирование нанобъектов.

8. Методы приготовления катализаторов на основе иммобилизованных комплексов, ферментов, клеток – использование материалов природы для конструирования каталитических систем. Нанесенные металлоорганические катализаторы. Разработка катализаторов с заданными молекулярно-ситовыми свойствами. Цеолиты и цеолито-подобные вещества. Слоистые материалы с регулируемым межслоевым пространством.

## **5. Образовательные технологии**

Основными видами образовательных технологий дисциплины «Молекулярный дизайн катализаторов» являются лекции, занятия в компьютерном классе и самостоятельная работа аспиранта. Для активизации познавательного процесса слушателям даются рекомендации по самостоятельной подготовке отдельных фрагментов лекций. Основной акцент образовательной работы делается на добросовестном, профессиональном выполнении учебных заданий.

Особое внимание уделяется выполнению курсовой работы тематика, объектами моделирования в которой выбираются системы, исследуемые магистрантом в работы по тематике магистрантской (дипломной) работы. Выбор темы курсовой работы проводится совместно с руководителем магистранта (студента).

## **6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

Самостоятельная работа магистранта включает дополнительную проработку разделов дисциплины, связанных с выполнением квалификационной работы; участие в научных конференциях и проблемных семинарах Института, подготовку докладов на конференции и конкурсы; освоение современного программного обеспечения, работу с литературой, знакомство с научными статьями в отечественных и зарубежных журналах, электронных изданиях; решение задач; поиск информации в базах данных. Самостоятельная

работа проводится в компьютерном классе, читальном зале библиотеки, в Информационно-аналитическом центре ИК СО РАН и на рабочем месте с доступом к ресурсам Интернет. Порядок выполнения самостоятельной работы соответствует программе курса и контролируется в ходе учебного процесса. Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим рекомендованные учебники и учебно-методические пособия, интернет-ресурсы для ученых и исследователей.

### **Домашние задания**

(с использованием комплекса программ Hyper Chem).

1. Визуализация химических объектов, построение 2D и формирование 3D моделей
2. Молекулярная геометрия и оценка свойств  
Длины связей и углы между ними в молекулярных моделях  
Дипольные моменты  
Потенциал ионизации, сродство к протону.  
Расчет и визуализация молекулярных орбиталей  
Диаграмма заселенности молекулярных орбиталей
3. Расчет энтальпии, энтропии молекул
4. Оценка энергии связей в простейших молекулах, межмолекулярные взаимодействия, энергия сольватации
5. Расчет электронных спектров различных молекул.
6. Расчет колебательных спектров органических соединений, визуализация колебательных мод.
7. Молекулярная динамика

### **Литература к практикуму**

HyperChem, Computational Chemistry, Hypercube, Inc.  
Manual (electronic version)

### **7. Рекомендованная литература к теоретическому курсу**

1. D.L.Trimm, Design of Industrial Catalysts, Chemical Engineering Monographs 11, ElsevierSci.Publ. Comp., 1980.
2. Ж.-М. Лен, Супрамолекулярная химия (Концепции и перспективы), Новосибирск, "Наука", 1998.

3. Г.Дюга, К.Пенни, Биоорганическая химия (Химические подходы к механизму действия ферментов), Москва, "Мир", 1983. ГПНТБ
4. У.Буркерт, Н.Эллинджер, Молекулярная механика, Москва, "Мир", 1986.
5. Наноструктурные материалы, под ред. Р. Ханника, А. Хилл, Москва: Техносфера, 2009. – 488 с. ISBN 978-5-98436-221-2.
6. Наноструктурные покрытия, под ред. А. Кавалейро, Д. де Хоссона, Москва: Техносфера, 2011. – 755 с. ISBN 978-5-94836-182-6
7. Размерные эффекты в наноматериалах, Э. Родунер, Москва: Техносфера, 2010. – 367 с. ISBN 978-5-98436-265-6
8. Нанотехнологии, Ч. Пул. – мл., Ф. Оуэнс, Москва: Техносфера, 2006. – 336 с. ISBN 978-5-98436-081-4
9. In –situ spectroscopy of catalysts, ed. Bert M. Weckhuysen, American Scientific Publishers, 2004. - 332p. ISBN 1-58883-026-8.
10. Современный катализ и химическая кинетика, И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт, Москва: Интеллект, 2010 – 504 с., ISBN 978-5-91559-044-0.
11. Л.Н.Кулешова, М.Ю.Антипин, Кембриджская Структурная База данных как инструмент для исследований структурных свойств органических молекулярных кристаллов. Успехи химии, 68(1) 1999.
12. J.Rebek, Jr., Molecular Recognition with Model Systems, in *Angew.Chem.Int.Ed.Engl.* 29 (1990) 245-255.
13. R.Hoss and F.Vogtle, Template Syntheses, *Angew.Chem.Int.Ed.Engl.* 33(1994) 375-384
14. Surface Organometallic Chemistry: Molecular Approaches to Surface Catalysis, ed. J.-M.Basset et al., NATO ASI Series, Series C: Mathematical and Physical Sciences, v.231, Kluwer Academic Publishers, 1988. Библиотека ИК
15. А.Е.Шилов, Metal Complexes in Biomimetic Chemical Reactions: N<sub>2</sub> Fixation in Solutions, Activation and oxidation of alkanes, Chemical models of Photosynthesis, NY, CRS Press, 1997. Библиотека ИК
16. К.И.Замараев, В.Л.Кузнетсов, Catalysts and Adsorbents, in Chemistry of Advanced Materials, ed. C.N.R.Rao, IUPAC, Chemistry for the 21st Century, Blackwell Sci.Publications, 1993, 321-350. Библиотека ИК

17. Applied Homogeneous Catalysis with Organometallic Compounds, A comprehensive Handbook in Two Volumes (eds. B.Cornils, W.A.Herrman), VCH, 1996. библиотека ИК
18. Handbook of Heterogeneous Catalysis, (eds. G.Ertl, H.Knozinger, J.Weitkamp), Wiley-VCH, vol.1-5 (1997). – библиотека ИК
19. Molecular View of Heterogeneous Catalysis. (ed. E.G.Derouane), 1 La Bibliotheque Scientifique Franequi est publiee avec le concours de la fondation Franequi, De Boeck & Larcier s.a. , Departement DE Boeck Universite, Parix, Bruxelles, 1998. – библиотека ИК

## **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

1. W.C.Conner, Jr., and J.L.Falconer, Spillover in Heterogeneous Catalysis, Chem.Rev. (1995) 95, 759-788.-ГПИТБ.
2. A.L.Linsebigler, G.Lu, and J.Yates, Jr. Photocatalysis on TiO<sub>2</sub> Surfaces: Principles, Mechanisms, and Selected Results, Chem.Rev. (1995) 95, 735-758.-ГПИТБ.
3. Thermal-Spray Processing of Materials – MRS Bulletin, 25, No.7 (2000).
4. Applications of Ultrasound to Material Chemistry – MRS Bulletin, 20, No.4 (1995).
5. Solid Electrolites – MRS Bulletin, 25, No.3 (2000).
6. The Materials Science of Field-Responsible Fluids – MRS Bulletin, 23, No.8 (1998).
7. Novel Methods of Nanoscale Wire Formation- MRS Bulletin, 24, No.8 (1999).
8. Emerging Methods for Micro- and Nanofabrication - MRS Bulletin, 26, No.7 (2001).

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Компьютерный терминальный класс (15 рабочих мест)  
 Сервер, персональные компьютеры с необходимым ПО (10),  
 Мультимедийный проектор Epson EB1860, ноутбук, экраны.  
 Комплекс лицензионных программ для молекулярного моделирования: HyperChem 8.01.  
 Программа POWDER CELL 1.8b,

Электронные базы данных :

Inorganic Crystal Structure Database, Fachinformationszentrum  
(FIZ) Karlsruhe ;

Cambridge Structural Database System for Windows,  
PowderDiffractionFile (PDF)

Вычислительный кластер лаборатории квантовой химии ИК СО  
РАН, 120 процессорных ядер (3ГГц) с комплексом программ для  
квантово-химических расчетов

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС  
ВПО и с ОС ВПО, принятым в ФГАОУ ВО Новосибирский  
национальный исследовательский государственный университет, с  
учетом рекомендаций ООП ВПО по направлению «020100 ХИМИЯ».

Автор:

Кузнецов Владимир Львович, к.х.н., доцент, кафедры адсорбции  
и катализа ФЕН, рук. группы ИК СО РАН \_\_\_\_\_

подпись

Программа одобрена на заседании кафедры адсорбции и  
катализа

"\_21\_" апреля\_ 2014 г.

Секретарь кафедры к.х.н., ассистент



И.В. Делий