

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Полябин Сергей Владимирович
Должность: Ректор
Дата подписания: 24.01.2025 14:50:06
Уникальный программный код:
7e7751705ad67ae2d6395985e6e9170fe0ad074c

МИНИСТЕРСТВО СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московская государственная академия ветеринарной медицины и
биотехнологии – МВА имени К.И. Скрябина»

Утверждаю:
Проректор по учебной,
воспитательной работе
и молодежной политике
С.Ю. Пигина
«20» *января* 2023г.

Кафедра
Радиобиологии и биофизики имени академика А.Д.Белова

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Квантовая химия и строение молекул»

Направление подготовки:

06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика»

профиль подготовки

Генетика и селекция сельскохозяйственных животных

Уровень высшего образования


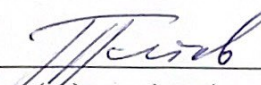
специалитет

форма обучения: очная

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) СОСТАВЛЕНА НА ОСНОВАНИИ:

- Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования (ФГОС ВО) по специальности 06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика (специалитет), утвержденный приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 12 августа 2020 г., регистрационный № 973

РАЗРАБОТЧИКИ:

Заведующий кафедрой <hr/> <i>(должность)</i>	 <hr/> <i>(подпись, дата)</i>	М.В.Щукин <hr/> <i>(ФИО)</i>
Профессор <hr/> <i>(должность)</i>	 <hr/> <i>(подпись, дата)</i>	В.Ю. Титов <hr/> <i>(ФИО)</i>

РЕЦЕНЗЕНТ:


профессор кафедры
вирусологии и
микробиологии им.
академика В.Н. Сюрин,
ФГБОУ ВО «МГАВМиБ
– МВА имени К.И.
Скрябина»,

<hr/> <i>(должность)</i>	 <hr/> <i>(подпись, дата)</i>	д.б.н. Е.И. Ярыгина <hr/> <i>(ФИО)</i>
--------------------------	--	---


РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА:

- на заседании кафедры Радиобиологии и биофизики имени академика А.Д. Белова




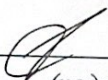
Протокол заседания № 7 от «12» декабрь 2023 г

Заведующий кафедрой <hr/> <i>(должность)</i>	 <hr/> <i>(подпись, дата)</i>	М.В.Щукин <hr/> <i>(ФИО)</i>
---	---	---------------------------------

- на заседании Учебно-методической комиссии факультета зоотехнологий и агробизнеса
Протокол заседания № 5 от «18» января 2024 г.

Председатель комиссии <hr/> <i>(должность)</i>	 <hr/> <i>(подпись, дата)</i>	Г.В. Мкртчян <hr/> <i>(ФИО)</i>
---	---	------------------------------------

СОГЛАСОВАНО:

Начальник учебно-методического управления <hr/> <i>(должность)</i>	 <hr/> <i>(подпись, дата)</i>	С.А.Захарова <hr/> <i>(ФИО)</i>
Руководитель сектора организации учебного процесса УМУ <hr/> <i>(должность)</i>	 <hr/> <i>(подпись, дата)</i>	Ю.П. Жарова <hr/> <i>(ФИО)</i>
Декан факультета зоотехнологий и агробизнеса <hr/> <i>(должность)</i>	 <hr/> <i>(подпись, дата)</i>	А.А. Васильев <hr/> <i>(ФИО)</i>
Директор библиотеки <hr/> <i>(должность)</i>	 <hr/> <i>(подпись, дата)</i>	Н.А. Москвитина <hr/> <i>(ФИО)</i>

1. ПЕРЕЧЕНЬ СОКРАЩЕНИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ТЕКСТЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

1. ОПОП – основная профессиональная образовательная программа
2. УК – универсальная компетенция
3. ОПК – общепрофессиональная компетенция
4. ПК – профессиональная компетенция
5. з.е. – зачетная единица
6. ФГОС ВО – федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования
7. РПД – рабочая программа дисциплины
8. ФОС – фонд оценочных средств
9. СР – самостоятельная работа

2. ОСНОВНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИСЦИПЛИНЫ

Цель дисциплины:

Целью освоения дисциплины «Квантовая химия и строение молекул» является формирование у обучающихся навыков применения информации о строении молекул и методов квантовой химии для профессионального использования в биоинженерии и биоинформатике

Задачи дисциплины:

- формирование у обучающихся логически упорядоченных знаний о наиболее важных законах и моделях описания природы;
- ознакомление обучающихся с методами квантовой механики и квантовой химии и направлениями практического применения их в биоинженерии и биоинформатике;
- освоение основных экспериментальных навыков квантовой химии, необходимых для использования в биоинженерии и биоинформатике.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Процесс изучения дисциплины «Биофизика» направлен на формирование и развитие следующих компетенций, согласно ФГОС ВО по направлению подготовки 06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика»: ОПК-2

Изучение данной дисциплины направлено на формирование у обучающихся компетенции, представленных в табл. 1

Таблица 1

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции (или ее части)	Индикаторы достижения компетенций	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны:		
				знать	уметь	владеть
1.	ОПК-2	Способен использовать специализированные знания фундаментальных разделов математики, физики, химии и биологии для проведения	ОПК- 2.1 – демонстрирует специализированные знания фундаментальных разделов математики, физики, химии и биологии; ОПК- 2. 2 –	основные идеи и положения квантовой химии, основы математического аппарата квантовой химии, основные идеи и характеристики современных	применять полученные знания при рассмотрении общехимических вопросов, интерпретировать основные положения химии с точки зрения	приемами простых квантовомеханических и квантово-химических расчётов и их различных вариантов с применением ПК

	исследований в области биоинженерии, биоинформатики и смежных дисциплин (модулей)	проводит экспериментальные исследования в области биоинженерии, биоинформатики с учетом специализированных фундаментальных знаний.	вычислительных методов квантовой химии	квантовой теории, применять результаты расчётов для интерпретации свойств и реакционной способности молекул	
--	---	--	--	---	--

4. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

В соответствии с учебным планом по направлению подготовки специальности 06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика» дисциплина «Квантовая химия и строение молекул» относится к обязательной части Блока 1.

Для изучения данной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые дисциплинами при получении высшего образования: «Химия», «Математика», «Физика».

Дисциплина «Квантовая химия и строение молекул» является базовой для изучения следующих дисциплин: «Молекулярная генетика», «Практическая генетика», «Биоинформатика», «Генная инженерия», «Анализ биоинформационных данных», а также практик: «Производственная практика: научно-исследовательская работа», «Преддипломная практика», «Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы»

5. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общий объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.

Вид учебной работы	Всего, час.	Очная форма обучения			
		семестр			
		4	-	-	-
Общий объем дисциплины	108	108	-	-	-
Контактная работа (аудиторная):	56,3	56,3	-	-	-
лекции	18	18	-	-	-
занятия семинарского типа, в том числе:	36	36	-	-	-
семинары	18	18	-	-	-
коллоквиумы	-	-	-	-	-
практические занятия	10	10	-	-	-
практикумы	-	-	-	-	-
лабораторные работы	8	8	-	-	-
другие виды контактной работы	2,3	2,3	-	-	-
Контактная работа (внеаудиторная)	-	-	-	-	-
Самостоятельная работа обучающихся:	51,7	51,7	-	-	-
изучение теоретического курса	-	-	-	-	-
выполнение домашних заданий (РГР, решение задач, реферат, эссе и другое)	-	-	-	-	-
курсовое проектирование	-	-	-	-	-
другие виды самостоятельной работы	51,7	51,7	-	-	-
Промежуточная аттестация:			-	-	-
зачет	-	-	-	-	-
экзамен	экз	экз	-	-	-
другие виды промежуточной аттестации	-	-	-	-	-

6. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Разделы дисциплины (модуля):

№ раздела	Наименование раздела	Очная форма				ИДК
		Лекции, час.	Занятия семинарского типа, час.		СР, час.	
			Семинары, практические занятия и др.	Практикумы, лабораторные работы		
1.	Предмет квантовой химии и теории строения молекул	2	4	-	5	ОПК-2
2.	Квантовомеханическое описание простых квантовых систем.	2	2	4	7	ОПК-2
3.	Квантовый гармонический осциллятор.	2	4	-	7	ОПК-2
4.	Атом водорода, водородоподобные атомы и ионы. Многоэлектронные атомы.	4	4	-	6	ОПК-2
5.	Химическая связь и физические эффекты, приводящие к ее образованию.	2	0	4	6	ОПК-2
6.	Метод Хартри-Фока.	2	4	-	6	ОПК-2
7.	Молекулярные свойства, определяемые электронной ВФ. ВЗМО и НСМО.	2	4	-	7	ОПК-2
8.	Современные квантовохимические методы.	2	4	2	7,7	ОПК-2
Итого:		18	26	10	51,7	

Содержание дисциплины (модуля) по видам занятий

Лекционные занятия

№ раздела	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Тема лекции	Объем, час.
1	Предмет квантовой химии и теории строения молекул	Феноменологические основы квантовой механики Феноменологическая формулировка квантовой механики. Волновая функция и уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции. Квантовомеханический принцип суперпозиции. Условия, которым должна удовлетворять волновая функция. Типы микрочастиц. Стандартная модель. Аксиоматическая формулировка квантовой механики. Операторы. Постулаты квантовой механики. Представление волновых функций и операторов векторами и матрицами. Свойства матриц и операций над ними. Примеры применения матриц в качестве операторов.	2
2	Квантовомеханическое описание простых квантовых	Одномерное движение свободной частицы. Трехмерное движение свободной частицы. Движение частицы в одномерном бесконечном потенциальном ящике. Частица в ящике с конечными стенками.	2

	систем.	Столкновение частиц с потенциальным барьером. Проявления туннельного эффекта и надбарьерного отражения в химии	
3	Квантовый гармонический осциллятор	Квантовый гармонический осциллятор в химии. Правила отбора. Движение квантовой частицы в поле центральной силы. Жесткий ротатор. Момент импульса квантовой системы и его связь с собственными функциями жесткого ротатора. Жесткий ротатор в химии.	2
4	Атом водорода, водородоподобные атомы и ионы. Многоэлектронные атомы.	Решение Уравнения Шредингера для атома водорода. Атомные орбитали. Физическая интерпретация квантовых чисел и связь движения с моментом импульса. Гамильтониан и физические особенности многоэлектронного атома. Количественный расчет характеристик многоэлектронных атомов.	4
5	Химическая связь и физические эффекты, приводящие к ее образованию.	Образование ковалентной связи в молекуле водорода. Образование ионной связи. Стабилизация молекул за счет делокализации электронной плотности. Приближенные методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов и молекул. Вариационный метод. Вариационный метод Ритца. Методы валентных связей и молекулярных орбиталей. Приближение Борна-Оппенгеймера. Приближение МО ЛКАО. Теория возмущений.	2
6	Метод Хартри-Фока.	Приближение Хартри. Требование антисимметрии волновой функции. Детерминант Слейтера. Кулоновский и обменный операторы. Процедура самосогласования. Уравнения Хартри-Фока. Канонические орбитали. Особенности и основные свойства уравнений Хартри-Фока. Физический смысл и свойства орбиталей в методе Хартри-Фока. Уравнения Хартри-Фока в приближении МО ЛКАО. Полуэмпирические приближения. Метод Хюккеля	2
7	Молекулярные свойства, определяемые электронной ВФ. ВЗМО и НСМО.	Теорема Купманса. Заряды атомов по Малликену, по Левдину, по Бейдеру, орбитальные заряды. Порядки связи и валентности атомов. Картина химического связывания в методе МО ЛКАО. Взаимодействие орбиталей. Корреляционные диаграммы. Качественная теория МО. Локализация орбиталей. Гибридизация. Натуральные орбитали. Натуральные орбитали связей. Квантовохимическая интерпретация валентного штриха и кекулевских структур.	2
8	Современные квантовохимические методы.	Точность квантовохимических методов. Основные источники погрешностей современных квантовохимических методов. Возможности современных квантовохимических методов, их ограничения, вычислительная эффективность, требования к вычислительной технике. Однотерминантные методы RHF, UHF, ROHF. Методы конфигурационного взаимодействия. Методы, основанные на теории возмущений. Методы связанных кластеров. Теория функционала плотности. Полуэмпирические методы.	2

Занятия семинарского типа

№ раздела	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Тема занятия, краткое содержание	Объем, час.
1.	Предмет квантовой химии и теории строения молекул.	Феноменологические основы квантовой механики. Корпускулярно-волновой дуализм Теория атома по Резерфорду и Бору	4
2.	Квантовомеханическое описание простых квантовых систем.	Квантовомеханическое описание простейших случаев движения микрочастиц Прохождение частиц через потенциальный барьер	6
3.	Квантовый гармонический осциллятор.	Квантовомеханическая теория водородоподобных атомов и ионов Теория многоэлектронных атомов. Атомные термы	4
4.	Атом водорода, водородоподобные атомы и ионы. Многоэлектронные атомы.	Теория многоэлектронных атомов. Вариационный принцип Квантовохимические методы описания молекул	4
5.	Химическая связь и физические эффекты, приводящие к ее образованию.	Использование симметрии в квантовой химии Разрыв связи в H_2 . Проблемы ограниченного метода Хартри-Фока. Полное конфигурационное взаимодействие	4
6.	Метод Хартри-Фока.	Вычисление параметров ЭПР спектра. Зависимость величин констант сверхтонкого взаимодействия от структуры на примерах CH_3 и CF_3 радикалов. Зависимость точности расчётов от размера используемого базиса Расчет термодинамики реакций, поиск переходного состояния.	4
7.	Молекулярные свойства, определяемые электронной ВФ. ВЗМО и НСМО.	Применение квантовой химии в реальных исследованиях в рамках научно-исследовательской практики Оптимизация геометрии. Расчёт частот колебаний. Теорема Купманса	4
8.	Современные квантовохимические методы.	Общие принципы выбора расчетной схемы и базисного набора для неэмпирических квантовых расчетов. Знакомство с базами данных по спектроскопии и термодинамическим характеристикам соединений различных классов.	6

Самостоятельная работа обучающегося

№ раздела	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Тема занятия	Вид СРС	Объем, час.
1.	Предмет квантовой химии и теории строения молекул.	Феноменологические основы квантовой механики. Корпускулярно-волновой дуализм Теория атома по Резерфорду и Бору	Изучение теоретического материала. Изучение видеолекций и виртуальных лабораторий, размещенных в открытом доступе (YouTube, Coursera и др.). Подготовка к занятиям.	5
2.	Квантовомеханическое описание простых квантовых систем.	Квантовомеханическое описание простейших случаев движения микрочастиц Прохождение частиц через потенциальный барьер	Изучение теоретического материала. Изучение видеолекций и виртуальных лабораторий, размещенных в открытом доступе (YouTube, Coursera и др.). Подготовка к занятиям.	7
3.	Квантовый гармонический осциллятор.	Квантовомеханическая теория водородоподобных атомов и ионов Теория многоэлектронных атомов. Атомные термы	Изучение видеолекций и виртуальных лабораторий, размещенных в открытом доступе (YouTube, Coursera и др.). Подготовка к занятиям	7
4.	Атом водорода, водородоподобные атомы и ионы. Многоэлектронные атомы.	Теория многоэлектронных атомов. Вариационный принцип Квантовохимические методы описания молекул	Изучение видеолекций и виртуальных лабораторий, размещенных в открытом доступе (YouTube, Coursera и др.). Подготовка к занятиям	6
5.	Химическая связь и физические эффекты, приводящие к ее образованию.	Использование симметрии в квантовой химии Разрыв связи в H_2 . Проблемы ограниченного метода Хартри-Фока. Полное конфигурационное взаимодействие	Изучение видеолекций и виртуальных лабораторий, размещенных в открытом доступе (YouTube, Coursera и др.). Подготовка к занятиям	6
6.	Метод Хартри-Фока.	Вычисление параметров ЭПР спектра. Зависимость величин констант сверхтонкого взаимодействия от структуры на примерах CH_3 и CF_3 радикалов. Зависимость точности расчётов от размера используемого базиса Расчет термодинамики реакций, поиск переходного состояния.	Изучение видеолекций и виртуальных лабораторий, размещенных в открытом доступе (YouTube, Coursera и др.). Подготовка к занятиям	6
7.	Молекулярные свойства, определяемые электронной ВФ. ВЗМО и НСМО.	Применение квантовой химии в реальных исследованиях в рамках научно-исследовательской практики Оптимизация геометрии.	Изучение видеолекций и виртуальных лабораторий, размещенных в открытом доступе (YouTube, Coursera и др.). Подготовка к занятиям	7

		Расчёт частот колебаний. Теорема Купманса		
8.	Современные квантовохимические методы.	Общие принципы выбора расчетной схемы и базисного набора для неэмпирических квантовых расчетов. Знакомство с базами данных по спектроскопии и термодинамическим характеристикам соединений различных классов.	Изучение видеолекций и виртуальных лабораторий, размещенных в открытом доступе (YouTube, Coursera и др.). Подготовка к занятиям	7,7

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Перечень основной и дополнительной литературы:

Основная литература

1. Барановский В.И. Квантовая химия и строение молекул [Электронный ресурс] -428 с. — ISBN 978-5-8114-3961-4 URL: Лань: электронно-библиотечная система. <https://e.lanbook.com/book/206195> Санкт-Петербург: Лань, 2022.
2. Назмитдинов Р. Г., Новикова С. А. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие [Электронный ресурс]. — 123 с. — ISBN 978-5-8114-1608-0 Лань: электронно-библиотечная система. <https://e.lanbook.com/book/211691> Санкт-Петербург : Лань, 2021
3. Александрова Э.А. Неорганическая химия. Теоретические основы и лабораторный практикум: учебник [Электрон-ный ресурс] /3-е изд. -396 с, ISBN 978-5-8114-3473-2/ Лань: элект-ронно-библиотечная система. /URL <https://e.lanbook.com/book/130569> Санкт-Петербург: Лань, 2020
4. Кириллов В.В. Неорганическая химия. Теорети-ческие основы: : учебник [Элект-ронный ресурс] /-352 с.- ISBN 978-5-8114-4376-5 // Лань: элект-ронно-библиотечная система. URL <https://e.lanbook.com/book/131011> Санкт-Петербург: Лань, 2020
5. Сергеева И.В., Амаль-чиева О.А., Мохонько Ю.М., Андри-янова Ю.М., Гусакова Н.Н. Практикум по химии: физическая и коллоидная химия: учебное пособие [Электронный ресурс] /. — 209 с. ISBN 978-5-00140-947-2 http://library.sgau.ru/cgi-bin/irbis64r_01/cgiirbis_64.exe ФГБОУ ВО Саратовский ГАУ. – Сара-тов: Амирит, 2022
6. Кайгородова Е.А., Макаро-ва Н.А., Органическая, физическая и кол-лоидная химия: учебное пособие [Электронный ресурс] -137 с. Лань:электронно-библиотечная система.- URL: <https://e.lanbook.com/book/171574> Краснодар:КубГАУ,2020
7. Кумыков, Р.М., Игтiev А.Б. Физическая и коллоидная химия: учебное пособие – [Электронный ресурс] // , 236 с. Лань:электонно-библиотечная система.-URL: <https://e.lanbook.com/book/116357> ISBN 978-5-8114-2885-4 Санкт-Петербург: Лань, 2019
8. Игнатов С.К. Квантовая химия и строение молекул: Учебное пособие [Электронный ресурс] / - 136 с.: 60x90 1/16. <https://e.lanbook.com/book/153007> Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского университета 2016.
9. Крашенинин В. И., Кузьмина Л. В., Газенаур Е. Г. Квантовая химия [Электронный ресурс] / - 82 с. - <https://e.lanbook.com/book/135217> Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2019
10. Ширяев А.К. Квантовая механика и квантовая химия: Учебно-методическое пособие [Электронный ресурс] / 2-е изд., стер.. — 119 — // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/127839> Архитектурно-строительный институт Самарского государственного технического университета 2017

б) ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Для освоения дисциплины рекомендуются следующие сайты информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

Интернет-ресурсы: База данных Spectral Database for Organic Compounds (SDBS) - <http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs> База данных NIST Chemistry WebBook - <http://webbook.nist.gov/chemistry> База данных результатов квантовхимических расчетов Computed Property Data Base for Molecules (CPDB) - http://riodb.ibase.aist.go.jp/cpdb/index_e.html База данных химических сдвигов NmrShiftDB2 - <http://nmrshiftdb.nmr.uni-koeln.de> Программа Firefly - <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html> Электронный образовательный ресурс Хемоинформатика и молекулярное моделирование площадки - <http://zilant.kfu-learn.ru/course/view.php?id=376r>

периодические издания

<http://read.sgau.ru/files/pages/516/14241720620.pdf> (электронный журнал Вавиловского университета)

- 02.00.00 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ / Политематический сетевой электронный научный журнал Кубанского государственного аграрного университета,

<http://znanium.com/bookread2.php?book=524285>

Журналы: Аграрный научный журнал»- <http://agrojr.ru>

Журнал «Экология» -<http://www.naukaran.com/zhurnali/katalog/jekologijagEkaterin-burg>

в) информационные справочные системы и профессиональные базы данных:

Рекомендуется применять информационные справочные системы и профессиональные базы данных, доступ к которым организован библиотекой университета через локальную вычислительную сеть.с

Для пользования электронными изданиями рекомендуется использовать следующие информационные справочные системы и профессиональные базы данных:

1. Электронная библиотечная система «Лань» <http://e.lanbook.com>.

Электронная библиотека издательства «Лань» – ресурс, включающий в себя как электронные версии книг издательства «Лань», так и коллекции полнотекстовых файлов других российских издательств. После регистрации с компьютера университета – доступ с любого компьютера, подключенного к сети Интернет.

2. «Университетская библиотека ONLINE» <http://www.biblioclub.ru>.

Электронно-библиотечная система, обеспечивающая доступ к книгам, конспектам лекций, энциклопедиям и словарям, учебникам по различным областям научных знаний, материалам по экспресс-подготовке к экзаменам. После регистрации с компьютера университета – доступ с любого компьютера, подключенного к сети Интернет.

3. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU. <http://elibrary.ru>.

Российский информационный портал в области науки, медицины, технологии и образования. На платформе аккумулируются полные тексты и рефераты научных статей и публикаций. Доступ с любого компьютера, подключенного к сети Интернет. Свободная регистрация.

4. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам».

<http://window.edu.ru>.

Информационная система предоставляет свободный доступ к каталогу образовательных Интернет-ресурсов и полнотекстовой электронной учебно-методической библиотеке для общего и профессионального образования. Доступ с любого компьютера, подключенного к сети Интернет.

5. ЭБС «Юрайт» <http://www.biblio-online.ru>.

Электронно-библиотечная система издательства «Юрайт». Учебники и учебные пособия от ведущих научных школ. Тематика: «Бизнес. Экономика», «Гуманитарные и общественные науки», «Естественные науки», «Информатика», «Прикладные науки. Техника»,

«Языкознание. Иностранные языки». Доступ - после регистрации с компьютера университета с любого компьютера, подключенного к Internet.

6. Профессиональная база данных «Техэксперт».

Современные, профессиональные справочные базы данных, содержащие нормативно-правовую, нормативно-техническую документацию и уникальные сервисы.

7. Поисковые интернет-системы Яндекс, Rambler, Google и др.

г) информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса:

К информационным технологиям, используемым при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, относятся:

- персональные компьютеры, посредством которых осуществляется доступ к информационным ресурсам и оформляются результаты самостоятельной работы;
- проекторы и экраны для демонстрации слайдов мультимедийных лекций;
- активное использование средств коммуникаций (электронная почта, тематические сообщества в социальных сетях и т.п.).

8. ПЕРЕЧЕНЬ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства:

№	Наименование	Правообладатель ПО (наименование владельца ПО, страна)	Доступность (лицензионное, свободно распространяемое)	Ссылка на Единый реестр российских программ для ЭВМ и БД (при наличии)
1.	Операционная система UBLinux	ООО «Юбитех», Российская Федерация	Свободно распространяемое	https://reestr.digital.gov.ru/reestr/307624/
2.	Офисные приложения AlterOffice	ООО «Алми Партнер», Российская Федерация	Свободно распространяемое	https://reestr.digital.gov.ru/reestr/308464/
3.	Антивирус Dr. Web.	Компания «Доктор Веб», Российская Федерация	Лицензионное	https://reestr.digital.gov.ru/reestr/301426/

9. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

Оценочные средства для проведения текущего и промежуточного контроля знаний по дисциплине (модулю) «Квантовая химия и строение молекул» представлены в виде фонда оценочных средств (далее – ФОС) в Приложении к настоящей рабочей программе дисциплины (модуля).

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

№ п/п	Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы
1	Учебная аудитория для проведения учебных занятий, оснащенная оборудованием и техническими средствами обучения (№ 1)	Рабочее место преподавателя, рабочие места обучающихся, учебная доска, комплект мультимедийного оборудования (экран, проектор, компьютер, подключенный к сети «Интернет» и обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду ФГБОУ ВО МГАВМиБ – МВА имени К.И. Скрябина)
2	Учебная аудитория для проведения учебных занятий, оснащенная оборудованием и	Рабочее место преподавателя, рабочие места обучающихся, комплект специализированной

№ п/п	Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы
	техническими средствами обучения (№ 205) (г. Москва, улица Академика Скрябина 23, стр. 3)	мебели, интерактивная учебная доска, оборудование для проведения практических занятий по оптическим методам контроля биосистем (спектрофотометр, хемиллюминометр)
3	Учебная аудитория для проведения учебных занятий, оснащенная оборудованием и техническими средствами обучения (№ 204) (г. Москва, улица Академика Скрябина 23, стр. 3)	Рабочее место преподавателя, рабочие места обучающихся, комплект специализированной мебели, интерактивная учебная доска, оборудование для проведения практических занятий по оптическим методам контроля биосистем (спектрофотометр, хемиллюминометр)

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
текущего контроля / промежуточной аттестации обучающихся
при освоении ОПОП ВО, реализующей ФГОС ВО

Кафедра
Радиобиологии и биофизики имени академика А.Д.Белова

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

«Квантовая химия и строение молекул»

направление подготовки
06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика»

профиль подготовки
Генетика и селекция сельскохозяйственных животных

уровень высшего образования
специалитет

форма обучения: очная

1. ОЦЕНКА РЕЗУЛЬТАТОВ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Оценка уровня учебных достижений обучающихся по дисциплине осуществляется в виде текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

Текущий контроль успеваемости по дисциплине осуществляется в формах:

1. Опрос
2. Тест

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется в форме:
зачет

2. СООТНОШЕНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ И КРИТЕРИЕВ ОЦЕНИВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ СО ШКАЛОЙ ОЦЕНИВАНИЯ И УРОВНЕМ ИХ СФОРМИРОВАННОСТИ

Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания	Уровень сформированной компетенции
ОПК-2			
Знать: основные идеи и положения квантовой химии, основы математического аппарата квантовой химии, основные идеи и характеристики современных вычислительных методов квантовой химии	Глубокие знания основных идей и положений квантовой химии, основы математического аппарата квантовой химии, основных идей и характеристик современных вычислительных методов квантовой химии	Отлично	Высокий
	Несущественные ошибки в знании основных идей и положений квантовой химии, основ математического аппарата квантовой химии, основных идей и характеристик современных вычислительных методов квантовой химии	Хорошо	Повышенный
	Фрагментарные представления об основных идеях и положениях квантовой химии, основ математического аппарата квантовой химии, основных идей и характеристик современных вычислительных методов квантовой химии	Удовлетворительно	Пороговый
	Отсутствие знаний основных идей и положений квантовой химии, основ математического аппарата квантовой химии, основных идей и характеристик современных вычислительных методов квантовой химии	Неудовлетворительно	Не сформирован
Уметь: применять полученные знания при рассмотрении общехимических вопросов, интерпретировать основные положения химии с точки зрения квантовой теории, применять результаты расчётов для интерпретации свойств и реакционной способности молекул.	Уметь в совершенстве применять полученные знания при рассмотрении общехимических вопросов, интерпретировать основные положения химии с точки зрения квантовой теории, применять результаты расчётов для интерпретации свойств и реакционной способности молекул	Отлично	Высокий
	Уметь применять полученные знания при рассмотрении общехимических вопросов, интерпретировать основные положения химии с точки зрения квантовой теории, применять результаты расчётов для интерпретации свойств и реакционной способности молекул	Хорошо	Повышенный
	Уметь частично применять полученные знания при рассмотрении общехимических вопросов, интерпретировать основные положения химии с точки зрения квантовой теории, применять результаты расчётов для интерпретации свойств и реакционной способности молекул	Удовлетворительно	Пороговый
	Неумение применять полученные знания при рассмотрении общехимических вопросов, интерпретировать основные положения химии с точки зрения квантовой теории, применять результаты расчётов для интерпретации свойств и	Неудовлетворительно	Не сформирован

	реакционной способности молекул		
Владеть: приемами простых квантовомеханических и квантово-химических расчётов и их различных вариантов с применением ПК	Полное овладение приемами простых квантовомеханических и квантово-химических расчётов и их различных вариантов с применением ПК	Отлично	Высокий
	Владение приемами простых квантовомеханических и квантово-химических расчётов и их различных вариантов с применением ПК	Хорошо	Повышенный
	Фрагментарное владение приемами простых квантовомеханических и квантово-химических расчётов и их различных вариантов с применением ПК	Удовлетворительно	Пороговый
	Отсутствие навыков владения приемами простых квантовомеханических и квантово-химических расчётов и их различных вариантов с применением ПК	Неудовлетворительно	Не сформирован

3. ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ И ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

Текущий контроль успеваемости обучающихся:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Форма текущего контроля	Оценочные средства	ИДК
1.	Предмет квантовой химии и теории строения молекул	Опрос	Банк вопросов к опросу	ОПК-2
2.	Квантовомеханическое описание простых квантовых систем.	Опрос	Банк вопросов к опросу	ОПК-2
3.	Квантовый гармонический осциллятор.	1. Опрос 2. Тест	1. Банк вопросов к опросу 2. Банк тестовых заданий	ОПК-2
4	Атом водорода, водородоподобные атомы и ионы. Многоэлектронные атомы.	1. Опрос 2. Тест	1. Банк вопросов к опросу 2. Банк тестовых заданий	ОПК-2
5.	Химическая связь и физические эффекты, приводящие к ее образованию.	1. Опрос 2. Тест	1. Банк вопросов к опросу 2. Банк тестовых заданий	ОПК-2
6.	Метод Хартри-Фока.	1. Опрос 2. Тест	1. Банк вопросов к опросу 2. Банк тестовых заданий	ОПК-2
7.	Молекулярные свойства, определяемые электронной ВФ. ВЗМО и НСМО.	1. Опрос 2. Тест	1. Банк вопросов к опросу 2. Банк тестовых заданий	ОПК-2
8.	Современные квантовохимические методы.	1. Опрос 2. Тест	1. Банк вопросов к опросу 2. Банк тестовых заданий	ОПК-2

Промежуточная аттестация

Способ проведения промежуточной аттестации:

- зачёт проводится в 4 семестре 2 курса;

Перечень видов оценочных средств, используемых для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю):

1. Банк вопросов к зачету.

4. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

3.1. Входной контроль

Входной контроль – средство проверки знаний и умений обучающихся, которое может быть использовано для контроля приобретенных ранее при обучении навыков и умений.

Цель проведения входного контроля: проверка глубины знаний и умений, приобретенных ранее при обучении.

Примерные вопросы входного контроля

1. Основные понятия химии: атом, молекула, простое и сложное вещество, изотопы, химический элемент, типы химических реакций, атомная и молекулярная массы, моль, молярная масса, молярный объем.
2. Закон сохранения массы. Закон сохранения энергии. Взаимосвязь энергии и массы (уравнение Эйнштейна).
3. Закон постоянства состава. Закон кратных отношений. Нестехиометрические соединения.
4. Уравнение Менделеева - Клапейрона (уравнение состояния идеального газа).
5. Закон Авогадро и следствия из него.
6. Основные классы неорганических соединений (кислоты, соли, оксиды, основания): определение, типы, химические свойства, получение.
7. Закон эквивалентов. Понятие эквивалента, эквивалентного объема, молярной массы эквивалента. Расчет молярной массы эквивалента элемента, оксида, кислоты, основания, соли.
8. Основные сведения о строении атома (состав атомных ядер, изотопы, определение химического элемента).
9. Двойственная (корпускулярно-волновая) природа света, электрона.
10. Энергетическое состояние электрона в атоме. Физический смысл квантовых чисел.
11. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева. Электронная конфигурация атомов.
12. Порядок заполнения электронами орбиталей: принцип наименьшей энергии, принцип Паули, правило Хунда, правило Клечковского.
13. Периодический закон Д.И. Менделеева.
14. Зависимость свойств элементов от их положения в периодической системе.
15. Периодичность изменений свойств (радиус, энергия ионизации, сродство к электрону, электроотрицательность).
16. Химическая связь. Условия образования химической связи. Энергия связи.
17. Ковалентная связь (полярная и неполярная). Дипольный момент.
18. Свойства ковалентной связи: насыщенность, направленность (σ и π связи), поляризуемость.
19. Гибридизация орбиталей sp , sp^2 , sp^3 .
20. Обменный и донорно-акцепторный механизмы образования ковалентной связи.
21. Ионная связь. Природа и свойства ионной связи. Примеры образования.
22. Эволюция представления о элементарных химических частицах.
23. Роль химии в жизни человека.
24. Номенклатура неорганических соединений.

25. В чем состоит значение открытия Мозли?
26. Условия образования водородной связи.
27. Металлическая связь. Электронное строение и особенности свойств металлов.
28. Растворы. Виды растворов по агрегатному состоянию. Понятие растворителя, растворенного вещества.
29. Понятие: системы, фазы, гомогенные и гетерогенные системы.
30. Понятие растворителя, растворенного вещества. Гидратная теория Д.И. Менделеева. Сольватация. Гидратация. Сольваты. Гидраты.
31. Растворимость, произведение растворимости.
32. Концентрация раствора. Способы выражения концентрации растворов: а) массовая доля (процентная концентрация); б) молярная концентрация; в) молярная концентрация эквивалента; г) моляльная концентрация; д) титр. Формула титрования.
34. Особенности растворов кислот, оснований и солей.
35. Теория электролитической диссоциации (ТЭД) Аррениуса. Константа и степень диссоциации. Произведение растворимости.
36. Слабые электролиты, их свойства. Теория Аррениуса, её значение, недостатки.
37. Применение закона действующих масс к растворам слабых электролитов. Закон разбавления Оствальда.
38. Протонная теория Бренстеда-Лоури. Кислотно-основные пары.
39. Отклонение свойств растворов слабых электролитов от законов Вант-Гоффа и Рауля. Изотонический коэффициент, его связь со степенью диссоциации.
40. Особенности свойств растворов сильных электролитов. Теория Дебая-Хюккеля. Активность, коэффициент активности. Ионная сила раствора.
41. Применение закона действующих масс в гомогенных и гетерогенных системах. Активность иона.
42. Диссоциация воды. Ионное произведение воды. Водородный показатель (рН).
43. Гидролиз солей.
71. Строение комплексных соединений.
72. Виды химической связи в комплексах. Диссоциация комплексных соединений, Константа нестойкости.
73. Кристаллогидраты и двойные соли как комплексные соединения.
74. Пространственное расположение координированных групп в комплексе. Природа сил, обуславливающих комплексообразование.
75. Понятие скорости химической реакции. Математическое выражение.
76. Зависимость скорости химической реакции от концентрации реагирующих веществ (закон действующих масс). Константа скорости.
77. Зависимость скорости химических реакций от температуры. Правило Вант Гоффа. Уравнение Аррениуса.
78. Ускорение химических реакций (катализ). Понятие о катализаторах и каталитических реакциях. Механизм действия катализатора.
79. Изменение внутренней энергии и энтальпии в химических реакциях.
80. Закон Гесса и следствия из закона Гесса.
83. Окислительно-восстановительные реакции (ОВР). Степень окисления. Понятие процессов окисления, восстановления, окислителя, восстановителя.
84. Типы ОВР. Составление уравнений ОВР.
85. Комплексные соединения. Роль комплексных соединений в биосфере.
86. Зависимость скорости реакции от природы веществ. Энергия активации химических реакций. Активированный комплекс.
87. Химическое равновесие. Константа химического равновесия.
88. Факторы, влияющие на направление химических реакций и химическое равновесие (концентрация, температура, давление).
89. Обратимые и необратимые химические реакции. Признаки необратимости реакции

90. Живые организмы, как термодинамические системы.
91. Предмет органической химии. Теория химического строения А.М.Бутлерова.
92. Классификация органических соединений и номенклатура.
93. Гомологический ряд алканов. Изомерия. Номенклатура. Физические и химические свойства. Радикальные реакции: галогенирование, нитрование, сульфирование, окисление, крекинг.
94. Гомологический ряд алкенов. Геометрическая изомерия. Номенклатура. Физические и химические свойства. Реакции радикального и электрофильного присоединения галогенов, галогеноводородов, воды. Реакции окисления, полимеризации.
95. Гомологический ряд алкинов. Изомерия и номенклатура. Физические и химические свойства. Реакции электрофильного присоединения галогенов, галогеноводородов, воды. Реакции полимеризации, конденсации, восстановления, окисления. Реакции замещения подвижного атома водорода.
96. Гомологический ряд аренов. Изомерия, Номенклатура. Физические и химические свойства.

Тестовые задания

Тесты – это система стандартизированных заданий, позволяющих автоматизировать процедуру измерения уровня знаний и умений обучающегося.

По дисциплине «Химия» предусмотрено проведение устного и письменного тестирования. Тестирование рассматривается как контроль успеваемости и проводится после изучения определенной темы раздела дисциплины. В одном варианте теста содержится 5-10 вопросов. Каждый правильный ответ оценивается в 1, максимальная сумма баллов за тестирование 5-10.

Результаты тестирования учитываются при проведении промежуточной аттестации.

Пример тестового опроса

1. Энергия фотона в первом пучке света в 2 раза больше энергии фотона во втором пучке. Отношение длины электромагнитной волны в первом пучке света к длине волны во втором пучке равно

1) 1 2) 2 3) $\sqrt{2}$ 4) $\frac{1}{2}$

2. Электроскоп соединен с цинковой пластиной и заряжен отрицательным зарядом. При освещении пластины ультрафиолетовым светом электроскоп разряжается. С уменьшением частоты света при неизменной мощности светового потока максимальная кинетическая энергия освобождаемых электронов

1) не изменяется

2) уменьшается

3) увеличивается

4) сначала уменьшается, затем увеличивается

3. При освещении металлической пластины с работой выхода A монохроматическим светом длиной волны λ происходит фотоэлектрический эффект, максимальная кинетическая энергия освобождаемых электронов равна $E_{\text{макс}}$. Каким будет значение максимальной кинетической энергии фотоэлектронов при освещении монохроматическим светом длиной волны $0,5\lambda$ пластины с работой выхода $A/2$?

1) $E_{\text{макс}} - A/2$ 2) **$E_{\text{макс}} + A/2$** 3) $2E_{\text{макс}}$ 4) Больше $2E_{\text{макс}} + A/2$

4. В соответствии с одним из постулатов Н. Бора атом не излучает электромагнитную энергию, пока электрон...

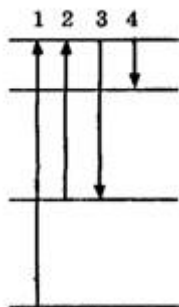
1) движется по первой стационарной орбите

2) движется по любой стационарной орбите

3) неподвижен

4) переходит с одной стационарной орбиты на другую

5. На рисунке представлена диаграмма энергетических уровней атома. Какой цифрой обозначен переход, соответствующий поглощению атомом фотона самой малой частоты?



- 1) 1 2) 2 3) 3 4) 4

Лабораторная работа

Лабораторная работа по квантовой химии- это форма обучения , позволяющая проверить умения и навыки выполнения вычислительного эксперимента по конкретному изучаемому методу анализа. Она основана на процессе осознания изучаемого материала на основе самостоятельной предварительной учебной деятельности обучающегося.

При этом обсуждаются наиболее трудные для усвоения и понимания вопросы.

При оценке лабораторной работы учитываются:

- знание основных понятий и законов по теме лабораторной работы,
- умение объяснить суть проведения эксперимента, сделать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы,
- степень самостоятельности при выполнении эксперимента,
- правильность проведения отдельных стадий лабораторной работы,
- письменный отчет по лабораторной работе, грамотность в оформлении

Лабораторная работа №___. «Получение информации из баз данных химических соединений»

Прежде чем синтезировать новое вещество или уже известное, но другим путем, проводят литературный поиск. Современные компьютерные базы данных содержат информацию обо всех открытых в настоящее время веществах. Проведение компьютерных расчетов методами квантовой химии позволяет оценить термодинамическую устойчивость соединения и осуществимость процесса синтеза, предсказать свойства еще не полученного соединения, выбрать один из возможных путей осуществления процесса.

Для этого могут потребоваться некоторые термодинамические характеристики веществ: молекулярный вес, длины связей и валентные углы (геометрическое строение), температуры фазовых переходов (изменения кристаллической структуры, плавления, кипения, сублимации, точки Кюри и др.), теплота образования, энтропия, температурные коэффициенты теплопроводности, энергии диссоциации; спектральные свойства (потенциалы ионизации, сродство к электрону, частоты и интенсивности колебаний, моменты инерции, коэффициенты экстинкции, химические сдвиги и др.)

Из сети Internet могут быть получены также программы квантово-химических расчетов, наборы базисных функций элементов, свойства веществ, рассчитанные методами квантовой химии.

Задание 1

- Найти ссылки на Фонд обмена квантово-химическими программами.
- Получить и сохранить каталог Фонда.

- Найти в каталоге описание программ неэмпирических квантово-химических расчетов.
- Сравнить программы:
 1. По платформе, на которую они рассчитаны,
 2. По учету энергии корреляции,
 3. По использованию базисных функций,
 4. По гибкости алгоритмов оптимизации энергии,
 5. По наличию вспомогательных визуализационных, редакционных и интерпретационных программ,
 6. По скорости выполнения расчетов
 7. По возможностям параллельных вычисления,
 8. По используемым форматам входных, выходных и промежуточных результатов.

Предлагается следующий список программ:

№вар.	<i>Ab initio</i>	<i>полуэмпирика</i>	<i>макромолекулы</i>	<i>вспомогательные</i>
1.	GAUSSIAN	МОРАС	VAMP	MOLDEN
2.	GAMESS	AMPAC	ASP	Chem-3D
3.	HyperChem	Chem-X	DIVA	BABEL
4.	CADPAC	PCModel	Пакет TSAR	GEOMVIEW
5.	SPARTAN	МОРАС	DL_POLY	Moledit
6.	CRYSTAL	AMPAC	MacroModel	Glu
7.	ALCHEMY	Chem-X	Пакет TSAR	Gm
8.	SYBYL	PCModel	DL_POLY	Mv
9.	XHF	Chem-X	MacroModel	Vega

Задание 2

В первой лабораторной работе Вы пользовались программой неэмпирических и полуэмпирических квантово-химических расчетов GAMESS. Полученные Вами результаты,

сохраненные в LOG файлах, могут быть легко обработаны специализированными визуализационными и интерпретационными программами.

- Вам предлагается найти и получить через сеть программы обработки результатов расчетов.
- С их помощью визуализировать рассчитанные в Вашей работе молекулы и определить их геометрические параметры (Vega).
- Научиться определять заряды на атомах, энергии орбиталей из LOG файла не с помощью текстового редактора, а с помощью специальной программы (Vega).
- Построить энергетическую диаграмму (Vega).
- Провести анализ выполнения процесса минимизации энергии в ходе расчетов по программе GAMESS, динамики градиента (Gm).

Задание 3

Во второй лабораторной работе Вы пользовались программой полуэмпирических квантово-химических расчетов. Если это были программы MOPAC или AMPAC, полученные Вами результаты могут быть легко обработаны специализированными визуализационными и интерпретационными программами. Если были использованы другие программы, воспользуйтесь тестовыми примерами, входящими в пакет программ.

- Вам предлагается найти и получить через сеть программы обработки результатов расчетов.
- С их помощью визуализировать рассчитанные в Вашей работе молекулы и определить их геометрические параметры (Glu, Mv).
- Научиться определять заряды на атомах, энергии орбиталей из LOG файла не с помощью текстового редактора, а с помощью специальной программы (Glu, Mv).
- Построить энергетическую диаграмму (Glu, Mv).

Задание 4

Для квантово-химических расчетов пленок, полимеров и кристаллов разработана программа CRYSTAL. Базисные функции, используемые в программе постоянно дополняются, т.о. позволяя рассчитывать свойства более широкого спектра соединений.

- Необходимо найти сайт разработчиков программы.
- Получить и сохранить описание на программу.
- Получить и сохранить тестовые примеры.
- Получить и сохранить список элементов, для которых имеются базисные функции. Описание выполнено в виде таблицы Менделеева в HTML формате. Для тех элементов, которые сопровождаются базисными наборами, в таблице есть гиперссылки.
- Получить и сохранить базисные функции, добавленные в течении 1999г.
- Список литературы с описанием результатов расчетов и выводов сохранить и проанализировать.

Задание 5

К наиболее серьезным преимуществам работы в сети является возможность выполнения расчетов на удаленном компьютере. Все современные научные, исследовательские и учебные центры, университеты, где сталкиваются с преподаванием и практическим использованием квантово-химических расчетов в своем компьютерном парке имеют суперкомпьютеры - рабочие станции, как правило RISC - архитектуры. Персональные же компьютеры используются лишь для обеспечения терминального доступа к ним. На персоналках составляются задания - входные и отладочные файлы. Таким образом обеспечивается рациональное использование вычислительных ресурсов. Что касается неэмпирических расчетов, то их выполнение на персоналках пять лет назад даже для простых молекул было нереальным по времени счета.

Для примера в приложении приведена страничка, с которой можно на удаленном компьютере посчитать молекулу воды.

- Найти сайты суперкомпьютерных центров, выполняющих проекты по квантовой химии.
- Найти центр, обеспечивающий тестовый или демонстрационный вход для выполнения неэмпирических расчетов.
- Получить информацию о вычислительных ресурсах выбранного центра.
- Выполнить расчет и сохранить информацию.
- Оценить производительность вычислений по приведенным центром данным (Benchmark).
- Оценить время счета для молекулы со 100, 200, 500 базисными функциями.
- Оценить число атомов в молекуле (из ряда H-Ag), на расчет которой уйдет день; неделя; месяц. Какую по сложности молекулу можно рассчитать за год непрерывных вычислений на CRAY-90.

Рубежный контроль

Представляет собой средство контроля усвоения учебного материала разделов дисциплины, организованное как учебное занятие в виде собеседования обучающегося и преподавателя.

-Цель проведения рубежного контроля

– проверка и оценка знаний и умений обучающихся по данному конкретному разделу дисциплины.

Вопросы рубежного контроля, рассматриваемые на аудиторных занятиях и выносимые на самостоятельное изучение:

Рубежный контроль №1

1. Предмет квантовой химии и теории строения молекул. 2. Феноменологические основы квантовой механики. Феноменологическая формулировка квантовой механики.
3. Волновая функция и уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции.
4. Квантовомеханический принцип суперпозиции. Условия, которым должна удовлетворять волновая функция.
5. Типы микрочастиц. Стандартная модель.
6. Аксиоматическая формулировка квантовой механики.
7. Операторы. Постулаты квантовой механики.
8. Представление волновых функций и операторов векторами и матрицами. Свойства матриц и операций над ними. Примеры применения матриц в качестве операторов.
9. Квантовомеханическое описание простых квантовых систем.
10. Одномерное движение свободной частицы.
11. Трехмерное движение свободной частицы.
12. Движение частицы в одномерном бесконечном потенциальном ящике.
13. Частица в ящике с конечными стенками.
14. Столкновение частиц с потенциальным барьером.
15. Проявления туннельного эффекта и надбарьерного отражения в химии.
16. Квантовый гармонический осциллятор в химии.
17. Правила отбора.
18. Движение квантовой частицы в поле центральной силы.
19. Жесткий ротатор.
20. Момент импульса квантовой системы и его связь с собственными функциями жесткого ротатора.
21. Жесткий ротатор в химии.

Рубежный контроль №2

1. Атом водорода, водородоподобные атомы и ионы. Многоэлектронные атомы.
2. Решение Уравнения Шредингера для атома водорода. Атомные орбитали. 3. Физическая интерпретация квантовых чисел и связь движения с моментом импульса.

4. Гамильтониан и физические особенности многоэлектронного атома. 5. Количественный расчет характеристик многоэлектронных атомов.
6. Химическая связь и физические эффекты, приводящие к ее образованию. 7. Образование ковалентной связи в молекуле водорода. Образование ионной связи. Стабилизация молекул за счет делокализации электронной плотности. 8. Приближенные методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов и молекул.
9. Вариационный метод.
10. Вариационный метод Ритца.
11. Методы валентных связей и молекулярных орбиталей.
12. Приближение Борна-Оппенгеймера.
13. Приближение МО ЛКАО. Теория возмущений.

Рубежный контроль №3

1. Метод Хартри-Фока.
2. Приближение Хартри.
3. Требование антисимметрии волновой функции.
4. Детерминант Слейтера.
5. Кулоновский и обменный операторы. Процедура самосогласования.
6. Уравнения Хартри-Фока. Канонические орбитали.
7. Особенности и основные свойства уравнений Хартри-Фока. Физический смысл и свойства орбиталей в методе Хартри-Фока.
8. Уравнения Хартри-Фока в приближении МО ЛКАО. Полуэмпирические приближения. Метод Хюккеля.
9. Молекулярные свойства, определяемые электронной ВФ.
10. ВЗМО и НСМО. Теорема Купманса.
11. Заряды атомов по Малликену, по Левдину, по Бейдеру, орбитальные заряды.
12. Порядки связи и валентности атомов.
13. Картина химического связывания в методе МО ЛКАО.
14. Взаимодействие орбиталей. Корреляционные диаграммы. Качественная теория МО.
15. Локализация орбиталей. Гибридизация. Натуральные орбитали. 16. Натуральные орбитали связей. Квантовохимическая интерпретация валентного штриха и кекулевских структур.
17. Современные квантовохимические методы. Точность квантовохимических методов.
18. Основные источники погрешностей современных квантовохимических методов. Возможности современных квантовохимических методов, их ограничения, вычислительная эффективность, требования к вычислительной технике.
19. Однодетерминантные методы RHF, UHF, ROHF. Методы конфигурационного взаимодействия. Методы, основанные на теории возмущений.
20. Методы связанных кластеров. Теория функционала плотности. Полуэмпирические методы.

3.6. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация в соответствии с учебным планом по направлению подготовки 06.05.01 «06.05.01 Биотехнология и биоинформатика», направленность (профиль) «Генетика и селекция сельскохозяйственных животных» по дисциплине «Квантовая химия и строение молекул» проводится в четвертом семестре в виде устного экзамена.

Подготовка обучающихся к прохождению промежуточной аттестации осуществляется в период проведения лекций, лабораторных работ, деловой игры, а также во внеаудиторные часы в рамках самостоятельной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся пользуются основной и дополнительной литературой.

В экзаменационный билет входят теоретические вопросы и практические расчетные задачи профессиональной направленности.

Во время экзамена обучающийся должен дать полный развернутый ответ на вопросы, указанные в билете, решить задачи профессиональной направленности. Преподаватель имеет право задавать дополнительные вопросы по изучаемой дисциплине.

**Вопросы, выносимые на экзамен
в четвертом семестре**

1. Предмет квантовой химии и теории строения молекул. 2. Феноменологические основы квантовой механики Феноменологическая формулировка квантовой механики.
3. Волновая функция и уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции.
4. Квантовомеханический принцип суперпозиции. Условия, которым должна удовлетворять волновая функция.
5. Типы микрочастиц. Стандартная модель.
6. Аксиоматическая формулировка квантовой механики.
7. Операторы. Постулаты квантовой механики.
8. Представление волновых функций и операторов векторами и матрицами. Свойства матриц и операций над ними. Примеры применения матриц в качестве операторов.
9. Квантовомеханическое описание простых квантовых систем.
10. Одномерное движение свободной частицы.
11. Трехмерное движение свободной частицы.
12. Движение частицы в одномерном бесконечном потенциальном ящике.
13. Частица в ящике с конечными стенками.
14. Столкновение частиц с потенциальным барьером.
15. Проявления туннельного эффекта и надбарьерного отражения в химии.
16. Квантовый гармонический осциллятор в химии.
17. Правила отбора.
18. Движение квантовой частицы в поле центральной силы.
19. Жесткий ротатор.
20. Момент импульса квантовой системы и его связь с собственными функциями жесткого ротатора.
21. Жесткий ротатор в химии.
22. Атом водорода, водородоподобные атомы и ионы. Многоэлектронные атомы.
23. Решение Уравнения Шредингера для атома водорода. Атомные орбитали. 24. Физическая интерпретация квантовых чисел и связь движения с моментом импульса.
25. Гамильтониан и физические особенности многоэлектронного атома. 26. Количественный расчет характеристик многоэлектронных атомов.
27. Химическая связь и физические эффекты, приводящие к ее образованию. 28. Образование ковалентной связи в молекуле водорода. Образование ионной связи. Стабилизация молекул за счет делокализации электронной плотности. 8. Приближенные методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов и молекул.
29. Вариационный метод.
30. Вариационный метод Ритца.
31. Методы валентных связей и молекулярных орбиталей.
32. Приближение Борна-Оппенгеймера.
33. Приближение МО ЛКАО. Теория возмущений.
34. Метод Хартри-Фока.
35. Приближение Хартри.
36. Требование антисимметрии волновой функции.
37. Детерминант Слейтера.
38. Кулоновский и обменный операторы. Процедура самосогласования.
39. Уравнения Хартри-Фока. Канонические орбитали.
40. Особенности и основные свойства уравнений Хартри-Фока. Физический смысл и свойства орбиталей в методе Хартри-Фока.

41. Уравнения Хартри-Фока в приближении МО ЛКАО. Полуэмпирические приближения. Метод Хюккеля.
42. Молекулярные свойства, определяемые электронной ВФ.
43. ВЗМО и НСМО. Теорема Купманса.
44. Заряды атомов по Малликену, по Левдину, по Бейдеру, орбитальные заряды.
45. Порядки связи и валентности атомов.
46. Картина химического связывания в методе МО ЛКАО.
47. Взаимодействие орбиталей. Корреляционные диаграммы. Качественная теория МО.
48. Локализация орбиталей. Гибридизация. Натуральные орбитали.
49. Натуральные орбитали связей. Квантовохимическая интерпретация валентного штриха и кекулевских структур.
50. Современные квантовохимические методы. Точность квантовохимических методов.
51. Основные источники погрешностей современных квантовохимических методов. Возможности современных квантовохимических методов, их ограничения, вычислительная эффективность, требования к вычислительной технике.
52. Однодетерминантные методы RHF, UHF, ROHF. Методы конфигурационного взаимодействия. Методы, основанные на теории возмущений.
53. Методы связанных кластеров. Теория функционала плотности.
54. Полуэмпирические методы.

Пример экзаменационного билета в четвертом семестре:

**МИНИСТЕРСТВО СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

**«Московская государственная академия ветеринарной медицины и биотехнологии –
МВА имени К.И. Скрябина»**

КАФЕДРА «Радиобиологии и биофизики имени академика А.Д. Белова»

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

по дисциплине **«Квантовая химия и строение молекул»**

1. Волновая функция и уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции.
2. ВЗМО и НСМО. Теорема Купманса.
3. Задача: Какова размерность матрицы Фока, которая будет использована в расчете азотистых оснований ДНК методом Хартри-Фока-Рутана с базисным набором $6\ 31+G(d)$?

Заведующий кафедрой _____ М.В. Щукин

**МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ ПРОЦЕДУРЫ
ОЦЕНИВАНИЯ ЗНАНИЙ, УМЕНИЙ, НАВЫКОВ И ОПЫТА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ,
ХАРАКТЕРИЗУЮЩИХ ЭТАПЫ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ**

Контроль освоения дисциплины «Квантовая химия и строение молекул» на этапах текущей и промежуточной аттестаций проводится в соответствии с действующими положениями:

- Положение о порядке проведения промежуточной аттестации обучающихся;
- Положение о порядке проведения текущего контроля успеваемости;
- Положение о балльно-рейтинговой системе оценки знаний студентов.

Критерии оценивания учебных действий обучающихся при проведении опроса

Отметка	Критерии оценивания
отлично	обучающийся четко выражает свою точку зрения по рассматриваемым вопросам, приводя соответствующие примеры
хорошо	обучающийся допускает отдельные погрешности в ответе
удовлетворительно	обучающийся обнаруживает пробелы в знаниях основного учебного и нормативного материала
неудовлетворительно	обучающийся обнаруживает существенные пробелы в знаниях основных положений дисциплины, неумение с помощью преподавателя получить правильное решение конкретной практической задачи

Критерии оценивания учебных действий обучающихся при проведении тестирования

Результат тестирования оценивается по процентной шкале оценки.

Каждому обучающемуся предлагается комплект тестовых заданий, количество которых приравнивается к 100%:

Отметка	Критерии оценивания
отлично	больше 85% правильных ответов
хорошо	66-85% правильных ответов
удовлетворительно	51-65% правильных ответов
неудовлетворительно	меньше 50% правильных ответов

Критерии оценивания учебных действий обучающихся при проведении экзамена

Отметка	Критерии оценивания
Отлично	Выполнены все виды учебной работы, предусмотренные учебным планом. Обучающийся демонстрирует соответствие знаний, умений, навыков приведённым в таблицах показателям, оперирует приобретёнными знаниями, умениями, навыками, применяет их в ситуациях повышенной сложности. При этом могут быть допущены неточности, затруднения при аналитических операциях, переносе знаний и умений на новые, нестандартные ситуации.
Хорошо	Выполнены все виды учебной работы, предусмотренные учебным планом. Обучающийся демонстрирует соответствие знаний, умений, навыков приведённым в таблицах показателям, оперирует приобретёнными знаниями, умениями, навыками, применяет их в стандартных ситуациях. При этом могут быть допущены незначительные ошибки, неточности, затруднения при аналитических операциях, переносе знаний и умений на новые, нестандартные ситуации.

удовлетворительно	Не выполнен один или более видов учебной работы, предусмотренных учебным планом. Обучающийся демонстрирует неполное соответствие знаний, умений, навыков приведенным в таблицах показателям, допускаются значительные ошибки, проявляется частичное отсутствие знаний, умений, навыков по ряду показателей, обучающийся испытывает значительные затруднения при оперировании знаниями и умениями при их переносе на новые ситуации.
неудовлетворительно	Не выполнены виды учебной работы, предусмотренные учебным планом. демонстрирует неполное соответствие знаний, умений, навыков приведенным в таблицах показателей, допускаются значительные ошибки, проявляется отсутствие знаний, умений, навыков по большому ряду показателей, обучающийся испытывает значительные затруднения при оперировании знаниями и умениями при их переносе на новые ситуации.