

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева»
(Астраханский государственный университет им. В. Н. Татищева)

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОПОП

А.М. Лихтер

«_02_» _июня_ 2022 г.

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой общей физики

А.М. Лихтер

«_02_» _июня_ 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

«Молекулярное моделирование»

Составитель(и)

**Лихтер А.М., профессор, д.т.н., заведующий
кафедрой общей физики
03.03.02 Физика**

Направление подготовки /
специальность

Направленность (профиль) ОПОП

Инженерная физика

Квалификация (степень)

бакалавр

Форма обучения

очная

Год приёма

2021

Курс

2

Семестр

3

Астрахань – 2022

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

1.1. Целями освоения дисциплины (модуля) «Молекулярное моделирование» является формирование у студентов начальных знаний и навыков в области математического моделирования биомолекул.

1.2. Задачи освоения дисциплины (модуля):

- изучить основные понятия и методы математического моделирования;
- приобрести навыки по моделированию биомолекул;
- сформировать начальные знания, умения и навыки по моделированию и обработке экспериментальных данных, в том числе с применением пакета прикладных программ.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина (модуль) «Молекулярное моделирование» относится к вариативной части (элективные дисциплины) и осваивается в 3 семестре.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины (модуля) необходимы следующие знания, умения, навыки, формируемые предшествующими учебными дисциплинами (модулями):

- *Математический анализ*
- *Численные методы и математическое моделирование*
- *Вычислительная физика (практикум на ЭВМ)*
- *Общий физический практикум*
- *Практикум решения физических задач*

Знания: в области теоретических методов исследования биологически активных молекул и молекулярного моделирования.

Умения: решать физические задачи, требующие применения дифференциального и интегрального математического аппарата. производить приближенные преобразования аналитических выражений.

Навыки: самостоятельной работы с учебными пособиями и монографической учебной литературой, работы на компьютере с математическими пакетами программ (например, MathCad, MathLab, Math- ematics), и текстовыми (например, MSWord, MSExcel) редакторами.

2.3. Последующие учебные дисциплины (модули) и (или) практики, для которых необходимы знания, умения, навыки, формируемые данной учебной дисциплиной (модулем):

- *Оптика*
- *Атомная физика*
- *Физика атомного ядра и элементарных частиц*
- *Дифракционный структурный анализ*
- *Магнитооптические явления (на английском языке)*
- *Магнитные измерения*
- *Избранные вопросы физики наносистем и наночастиц*

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

Процесс освоения дисциплины (модуля) направлен на формирование элементов следующей(их) компетенции(ий) в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному

направлению подготовки / специальности:

а) общепрофессиональной(ых) (ОПК);

ОПК-2 Способен осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ информации из различных источников и баз данных, представлять ее в требуемом формате с использованием информационных, компьютерных и сетевых технологий.

в) профессиональной(ых) (ПК).

ПК-2 Способность проводить математическое моделирование процессов и объектов на базе стандартных пакетов автоматизированного проектирования и исследований.

Таблица 1 – Декомпозиция результатов обучения

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)		
	Знать	Уметь	Владеть
ОПК-2 Способен осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ информации из различных источников и баз данных, представлять ее в требуемом формате с использованием информационных, компьютерных и сетевых технологий.	ОПК-2.1.1 сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны	ОПК-2.2.1 понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны	ОПК-2.3.1 навыками понимания сущности и значения информации в развитии современного информационного общества, оценки опасности и угроз, возникающих в этом процессе, соблюдения основных требований информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны
ПК-2 Способность проводить математическое моделирование процессов и объектов на базе стандартных пакетов автоматизированного проектирования и исследований.	ПК-2.1.1 методы расчетно-теоретического исследования физических процессов, создания программ расчета количественных характеристик на ЭВМ ПК-2.1.2 методику расчета различных конформаций молекул и барьеров внутреннего вращения	ПК-2.2.1 использовать классические численные методы для решения задач ПК-2.2.2. реализовывать численные алгоритмы в виде законченных компьютерных программ	ПК-2.3.1. практическими навыками численного моделирования типовых задач в своей предметной области с требуемой степенью точности ПК-2.3.2. способами создания моделей для описания и прогнозирования различных явлений, осуществления их качественного и количественного

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)		
	Знать	Уметь	Владеть
			анализа

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Объём дисциплины (модуля) составляет 3 зачётных единицы, в том числе 57 часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (из них 19 часов(а) – лекции, 38 часов(а) – практические, семинарские занятия), и 51 часов – на самостоятельную работу обучающихся.

Таблица 2 – Структура и содержание дисциплины (модуля)

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Семестр	Контактная работа (в часах)			Самост. работа		Форма текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации <i>[по семестрам]</i>
		Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
Раздел 1. Методы расчета фундаментальных частот и интенсивностей спектров многоатомных молекул	3	4				6	
<i>Тема 1. Общее уравнение состояния молекулы (уравнение Шредингера)</i>	3	1				2	
<i>Тема 2. Вероятность перехода</i>	3	1				2	
<i>Тема 3. Принципы решения колебательной задачи</i>	3	2				2	
Раздел 2. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул	3	5				6	
<i>Тема 1. Уравнения Гамильтона</i>	3	1				2	
<i>Тема 2. Метрика естественной колебательной координаты</i>	3	2				2	
<i>Тема 3. Квантовые модели молекулярной динамики</i>	3	2				2	
Раздел 3. ИК-Фурье спектрометр Frontier	3	7				8	
<i>Тема 1. Вид установки</i>	3	1				2	
<i>Тема 2. Установка приставок</i>	3	2				2	
<i>Тема 3. Панели инструментов</i>	3	2				2	
<i>Тема 4. Возможности программного обеспечения</i>	3	2				2	

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Семестр	Контактная работа (в часах)			Самост. работа		Форма текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации <i>[по семестрам]</i>
		Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
Раздел 4. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул на примере программы Gaussian	3	3				4	
<i>Тема 1. Ввод исходных данных для квантовых расчетов</i>	3	2				2	
<i>Тема 2. Пример решения задачи(фенол)</i>	3	1				2	
Раздел 5. Практическая часть	3		38			27	
<i>Тема 1. Исследование оптических свойств ядохимиката «Фитоверм» и биомолекул перца</i>	3		4			3	
<i>Тема 2. Исследование оптических свойств биомолекул петрушки и яда «Алатар</i>	3		4			3	
<i>Тема 3. Исследование оптических свойств биомолекул томата и яда «Циткор»</i>	3		4			3	
<i>Тема 4. Исследование оптических свойств биомолекул клубники и яда «Карбофос»</i>	3		4			3	
<i>Тема 5. «Исследование оптических свойств биомолекул щавеля и яда «Фуфанон»</i>	3		4			3	
<i>Тема 6. Исследование оптических свойств биомолекул чеснока и яда «Медный купорос»</i>	3		4			3	
<i>Тема 7. Изучение влияния музыкальных композиций на биокультуры растений (на примере мелиссы)»</i>	3		4			3	
<i>Тема 8. Исследование оптических свойств баклажана «Мраморный» и яда «Фитоверм»</i>	3		4			3	

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Семестр	Контактная работа (в часах)			Самост. работа		Форма текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации <i>[по семестрам]</i>
		Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
<i>Тема 9. Изучение влияния яддохимикатов на биокультуры растений (на примере лука батуна)</i>	3		4			3	
<i>Тема 10. Представление и защита проектной работы</i>	3		2				
Итого	3	19	38			51	Зачёт

Примечание: Л – лекция; ПЗ – практическое занятие, семинар; ЛР – лабораторная работа; КР – курсовая работа; СР – самостоятельная работа.

Таблица 3 – Матрица соотнесения разделов, тем учебной дисциплины (модуля) и формируемых компетенций

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Кол-во часов	Код компетенции		Общее количество компетенций
		ОПК-2	ПК-2	
Раздел 1. Методы расчета фундаментальных частот и интенсивностей спектров многоатомных молекул	10	+		1
<i>Тема 1. Общее уравнение состояния молекулы (уравнение Шредингера)</i>	3	+		1
<i>Тема 2. Вероятность перехода</i>	3	+		1
<i>Тема 3. Принципы решения колебательной задачи</i>	4	+		1
Раздел 2. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул	11	+		1
<i>Тема 1. Уравнения Гамильтона</i>	3	+		1
<i>Тема 2. Метрика естественной колебательной координаты</i>	5	+		1
<i>Тема 3. Квантовые модели молекулярной динамики</i>	4	+		1
Раздел 3. ИК-Фурье спектрометр Frontier	15	+		1
<i>Тема 1. Вид установки</i>	3	+		1
<i>Тема 2. Установка приставок</i>	4	+		1
<i>Тема 3. Панели инструментов</i>	4	+		1

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Кол-во часов	Код компетенции		Общее количество компетенций
		ОПК-2	ПК-2	
<i>Тема 4. Возможности программного обеспечения</i>	4	+		1
Раздел 4. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул на примере программы Gaussian	7	+		1
<i>Тема 1. Ввод исходных данных для квантовых расчетов</i>	4	+		1
<i>Тема 2. Пример решения задачи(фенол)</i>	3	+		1
Раздел 5. Практическая часть	65	+	+	2
<i>Тема 1. Исследование оптических свойств ядохимиката «Фитоверм» и биомолекул перца</i>	7	+	+	2
<i>Тема 2. Исследование оптических свойств биомолекул петрушки и яда «Алатар</i>	7	+	+	2
<i>Тема 3. Исследование оптических свойств биомолекул томата и яда «Циткор»</i>	7	+	+	2
<i>Тема 4. Исследование оптических свойств биомолекул клубники и яда «Карбофос»</i>	7	+	+	2
<i>Тема 5. «Исследование оптических свойств биомолекул щавеля и яда «Фуфанон»</i>	7	+	+	2
<i>Тема 6. Исследование оптических свойств биомолекул чеснока и яда «Медный купорос»</i>	7	+	+	2
<i>Тема 7. Изучение влияния музыкальных композиций на биокультуры растений (на примере Melissa)»</i>	7	+	+	2
<i>Тема 8. Исследование оптических свойств баклажана «Мраморный» и яда «Фитоверм»</i>	7	+	+	2
<i>Тема 9. Изучение влияния ядохимикатов на</i>	7	+	+	2

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Кол-во часов	Код компетенции		Общее количество компетенций
		ОПК-2	ПК-2	
<i>биокультуры растений (на примере лука батуна)</i>				
<i>Тема 10. Представление и защита проектной работы</i>	2	+	+	2
Итого	108			Зачет

Краткое содержание каждой темы дисциплины (модуля)

Раздел 1. Методы расчета фундаментальных частот и интенсивностей спектров многоатомных молекул

Тема 1. Общее уравнение состояния молекулы (уравнение Шредингера)

Повторение общего уравнения состояния молекулы - уравнения Шредингера.

Тема 2. Вероятность перехода

Гамильтониан. Уравнения Гамильтона. Описание состояния свободного электромагнитного поля излучения. Молекула-поле. Средняя скорость изменения вероятности перехода.

Тема 3. Принципы решения колебательной задачи

Координатное представление уравнения Шредингера. Уравнение Шредингера для молекулы в пространстве импульсов электронов.

Раздел 2. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул

Тема 1. Уравнения Гамильтона

Математическая модель движения атомов. Функция Гамильтона. Адиабатический потенциал молекулярного объекта. Анггармоническое слагаемое. Гармонические силовые постоянные.

Тема 2. Метрика естественной колебательной координаты

Определяющие для получения искомой Метрики. Метрическое соотношение.

Тема 3. Квантовые модели молекулярной динамики

Адиабатический потенциал. Первая модель. Вторая модель. Вид обратной метрики, связывающая декартовые координаты с естественными координатами.

Раздел 3. ИК-Фурье спектрометр Frontier

Тема 1. Вид установки

Спектрометр и его характеристики.

Тема 2. Установка приставок

Алгоритм установки приставки.

Тема 3. Панели инструментов

Разновидность панелей инструментов. Общие и локальные панели инструментов.

Тема 4. Возможности программного обеспечения

Измерение спектра фона. Продолжение сканирования. Сканирование образца. Спектральный калькулятор. Вырезать. Сравнить. Разность.

Раздел 4. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул на примере программы Gaussian

Тема 1. Ввод исходных данных для квантовых расчетов

Директивы процессора. Спецификация задачи. Заголовок задачи. Спецификация молекулы. Заряд молекулы и ее мультиплетность. Начальная геометрия молекулы. Дополнительные разделы

Тема 2. Пример решения задачи(фенол)

Описание и разбор шагов решения задачи.

Раздел 5. Практическая часть

Тема 1. Исследование оптических свойств ядохимиката «Фитоверм» и биомолекул перца.

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 2. Исследование оптических свойств биомолекул петрушки и яда «Алатар»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 3. Исследование оптических свойств биомолекул томата и яда «Циткор»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 4. Исследование оптических свойств биомолекул клубники и яда «Карбофос»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 5. «Исследование оптических свойств биомолекул щавеля и яда «Фуфанон»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 6. Исследование оптических свойств биомолекул чеснока и яда «Медный купорос»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 7. Изучение влияния музыкальных композиций на биокультуры растений (на примере мелиссы)»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 8. Исследование оптических свойств баклажана «Мраморный» и яда «Фитоверм»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 9. Изучение влияния ядохимикатов на биокультуры растений (на примере лука батуна)

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 10. Представление и защита проектной работы

Защита проекта по выбранной теме.

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ПРЕПОДАВАНИЮ И ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

5.1. Указания для преподавателей по организации и проведению учебных занятий по дисциплине (модулю)

- изучение теоретического материала по конспектам лекций рекомендованным учебным пособиям, монографической учебной литературе;
- самостоятельное изучение некоторых теоретических вопросов, выделенных в программе дисциплины, нерассмотренных на лекциях;
- выполнение комплекса заданий теоретического характера, расчетных и графических по всем разделам дисциплины;

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины (модулю)

Таблица 4 – Содержание самостоятельной работы обучающихся

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Форма работы
Раздел 1. Методы расчета фундаментальных частот и интенсивностей спектров многоатомных молекул	6	
<i>Тема 1. Общее уравнение состояния молекулы (уравнение Шредингера)</i>	2	Прочтение учебного пособия
<i>Тема 2. Вероятность перехода</i>	2	Прочтение учебного пособия
<i>Тема 3. Принципы решения колебательной задачи</i>	2	Прочтение учебного пособия
Раздел 2. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул	6	
<i>Тема 1. Уравнения Гамильтона</i>	2	Прочтение учебного пособия
<i>Тема 2. Метрика естественной колебательной координаты</i>	2	Прочтение учебного пособия
<i>Тема 3. Квантовые модели молекулярной динамики</i>	2	Прочтение учебного пособия
Раздел 3. ИК-Фурье спектрометр Frontier	8	

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Форма работы
Раздел 1. Методы расчета фундаментальных частот и интенсивностей спектров многоатомных молекул	6	
<i>Тема 1. Вид установки</i>	2	Прочтение учебного пособия
<i>Тема 2. Установка приставок</i>	2	Прочтение учебного пособия
<i>Тема 3. Панели инструментов</i>	2	Прочтение учебного пособия
<i>Тема 4. Возможности программного обеспечения</i>	2	Прочтение учебного пособия
Раздел 4. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул на примере программы Gaussian	4	
<i>Тема 1. Ввод исходных данных для квантовых расчетов</i>	2	Прочтение учебного пособия
<i>Тема 2. Пример решения задачи(фенол)</i>	2	Прочтение учебного пособия
Раздел 5. Практическая часть	27	
<i>Тема 1. Исследование оптических свойств ядохимиката «Фитоверм» и биомолекул перца</i>	3	Выполняется проектная работа
<i>Тема 2. Исследование оптических свойств биомолекул петрушки и яда «Алатар»</i>	3	Выполняется проектная работа
<i>Тема 3. Исследование оптических свойств биомолекул томата и яда «Циткор»</i>	3	Выполняется проектная работа
<i>Тема 4. Исследование оптических свойств биомолекул клубники и яда «Карбофос»</i>	3	Выполняется проектная работа
<i>Тема 5. «Исследование оптических свойств биомолекул щавеля и яда «Фуфанон»</i>	3	Выполняется проектная работа
<i>Тема 6. Исследование оптических свойств биомолекул чеснока и яда «Медный купорос»</i>	3	Выполняется проектная работа
<i>Тема 7. Изучение влияния музыкальных композиций на биокультуры растений (на примере мелиссы)»</i>	3	Выполняется проектная работа
<i>Тема 8. Исследование оптических свойств баклажана «Мраморный» и яда «Фитоверм»</i>	3	Выполняется проектная работа
<i>Тема 9. Изучение влияния ядохимикатов на биокультуры растений (на примере лука батуна)</i>	3	Выполняется проектная работа

5.3. Виды и формы письменных работ, предусмотренных при освоении дисциплины (модуля), выполняемые обучающимися самостоятельно

1. Рассмотреть двухатомную молекулу как гармонический осциллятор.
2. Решить уравнение Шредингера для гармонического осциллятора.
3. Рассмотреть двухатомную молекулу как ангармонический осциллятор.
4. Описать вращение двухатомной молекулы в рамках модели жесткого и нежесткого ротатора.
5. Рассмотреть колебательно-вращательное взаимодействие на примере

- двухатомной молекулы в рамках модели колеблющегося ротатора.
- Найти операции симметрии для молекулы бензола, порфина, транс-бета каротина.
 - Определить число базисных и примитивных функций для базисных наборов гауссовских функций 6-31 (d, p), 6-311+(d, p), 6-311(2dp,2df) в случае молекулы воды и молекулы бензола.
 - Подготовить исходные данные в формате программы Gaussian для расчета
 - Вычислить интенсивности в спектре комбинационного рассеяния света по заданным значениям компонент производных тензора поляризуемости по декартовым координатам. Вычислить интенсивности инфракрасного поглощения по заданным значениям компонент производных дипольного момента по декартовым координатам.
 - Записать в явном виде формулы необходимые для расчета термодинамических характеристик межмолекулярных комплексов и самоассоциатов.
 - Зная значения полной энергии и колебательные частоты молекулы воды и диммера молекулы воды, рассчитать термодинамические характеристики диммера образования.
 - Подготовить исходные данные в формате программы Gaussian для расчета электронной структуры и колебательных спектров 15-цис и 15-транс формы молекулы бета-каротина.

Проектная работа должна включать в себя следующие пункты: Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Дневник наблюдения. Спектры и таблицы данных. Анализ характеристических частот. Вывод.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

6.1. Образовательные технологии

Таблица 5 – Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практическое занятие, семинар	Лабораторная работа
Раздел 1. Методы расчета фундаментальных частот и интенсивностей спектров многоатомных молекул			
Тема 1. Общее уравнение состояния молекулы (уравнение Шредингера)	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено
Тема 2. Вероятность перехода	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено
Тема 3. Принципы решения колебательной задачи	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено
Раздел 2. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул			
Тема 1. Уравнения Гамильтона	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено
Тема 2. Метрика естественной колебательной координаты	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено
Тема 3. Квантовые модели молекулярной динамики	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено

Раздел 3. ИК-Фурье спектрометр Frontier			
Тема 1. Вид установки	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено
Тема 2. Установка приставок	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено
Тема 3. Панели инструментов	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено
Тема 4. Возможности программного обеспечения	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено
Раздел 4. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул на примере программы Gaussian			
Тема 1. Ввод исходных данных для квантовых расчетов	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено
Тема 2. Пример решения задачи(фенол)	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Не предусмотрено
Раздел 5. Практическая часть			
Тема 1. Исследование оптических свойств ядохимиката «Фитоверм» и биомолекул перца	Не предусмотрено	Проект	Не предусмотрено
Тема 2. Исследование оптических свойств биомолекул петрушки и яда «Алатар	Не предусмотрено	Проект	Не предусмотрено
Тема 3. Исследование оптических свойств биомолекул томата и яда «Циткор»	Не предусмотрено	Проект	Не предусмотрено
Тема 4. Исследование оптических свойств биомолекул клубники и яда «Карбофос»	Не предусмотрено	Проект	Не предусмотрено
Тема 5. «Исследование оптических свойств биомолекул щавеля и яда «Фуфанон»	Не предусмотрено	Проект	Не предусмотрено
Тема 6. Исследование оптических свойств биомолекул чеснока и яда «Медный купорос»	Не предусмотрено	Проект	Не предусмотрено
Тема 7. Изучение влияния музыкальных композиций на биокультуры растений (на примере мелиссы)»	Не предусмотрено	Проект	Не предусмотрено
Тема 8. Исследование оптических свойств баклажана «Мраморный» и яда «Фитоверм»	Не предусмотрено	Проект	Не предусмотрено
Тема 9. Изучение влияния ядохимикатов на биокультуры растений (на	Не предусмотрено	Проект	Не предусмотрено

примере лука батуна)			
-------------------------	--	--	--

6.2. Информационные технологии

При изучении дисциплины «Молекулярное моделирование» используется система управления обучением на платформе Электронное образование, созданная в Астраханском государственном университете (АГУ) с 2022 года. Она предоставляет возможность круглосуточного доступа к ресурсам (учебным материалам) курса, на которые подписан студент, его интерактивным действиям (независимо от местонахождения), а преподавателям – платформу для оперативного обнародования выставляемых оценок, важных событий и идей, для информирования студентов об изменениях в учебном процессе. По изучаемой дисциплине на выбранной платформе размещены задания для практических занятий, контрольные и тестовые задания, кейс-задачи. Платформа позволяет реализовывать как обучающий, так и контрольный режим выполнения заданий.

Также как источник информации широко используются электронные учебники и различные сайты как на договорной основе (смотри п. 6.3), так и находящиеся в свободном доступе.

6.3. Программное обеспечение, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

6.3.1. Программное обеспечение

Наименование программного обеспечения	Назначение
Adobe Reader	Программа для просмотра электронных документов
Платформа дистанционного обучения LMS Moodle	Виртуальная обучающая среда
Mozilla FireFox	Браузер
Microsoft Office 2013, Microsoft Office Project 2013, Microsoft Office Visio 2013	Пакет офисных программ
7-zip	Архиватор
Microsoft Windows 7 Professional	Операционная система
Kaspersky Endpoint Security	Средство антивирусной защиты
Google Chrome	Браузер
Notepad++	Текстовый редактор
OpenOffice	Пакет офисных программ
Opera	Браузер
Paint .NET	Растровый графический редактор
Scilab	Пакет прикладных математических программ
Microsoft Security Assessment Tool. Режим доступа: http://www.microsoft.com/ru-	Программы для информационной безопасности

Наименование программного обеспечения	Назначение
ru/download/details.aspx?id=12273 (Free) Windows Security Risk Management Guide Tools and Templates. Режим доступа: http://www.microsoft.com/en-us/download/details.aspx?id=6232 (Free)	
MathCad 14	Система компьютерной алгебры из класса систем автоматизированного проектирования, ориентированная на подготовку интерактивных документов с вычислениями и визуальным сопровождением
1С: Предприятие 8	Система автоматизации деятельности на предприятии
КОМПАС-3D V13	Создание трёхмерных ассоциативных моделей отдельных элементов и сборных конструкций из них
Blender	Средство создания трёхмерной компьютерной графики
PyCharm EDU	Среда разработки
R	Программная среда вычислений
VirtualBox	Программный продукт виртуализации операционных систем
VLC Player	Медиапроигрыватель
Microsoft Visual Studio	Среда разработки
Cisco Packet Tracer	Инструмент моделирования компьютерных сетей
CodeBlocks	Кроссплатформенная среда разработки
Eclipse	Среда разработки
Lazarus	Среда разработки
PascalABC.NET	Среда разработки
VMware (Player)	Программный продукт виртуализации операционных систем
Far Manager	Файловый менеджер
Sofa Stats	Программное обеспечение для статистики, анализа и отчётности
Maple 18	Система компьютерной алгебры
WinDjView	Программа для просмотра файлов в формате DJV и DjVu
MATLAB R2014a	Пакет прикладных программ для решения задач технических вычислений
Oracle SQL Developer	Среда разработки
VISSIM 6	Программа имитационного моделирования дорожного движения
VISUM 14	Система моделирования транспортных потоков
IBM SPSS Statistics 21	Программа для статистической обработки данных
ObjectLand	Геоинформационная система
КРЕДО ТОПОГРАФ	Геоинформационная система
Полигон Про	Программа для кадастровых работ

6.3.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

<i>Наименование современных профессиональных баз данных, информационных справочных систем</i>		
Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» http://dlib.eastview.com Имя пользователя: AstrGU Пароль: AstrGU		
Электронные версии периодических изданий, размещённые на сайте информационных ресурсов www.polpred.com		
Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» https://library.asu.edu.ru/catalog/		
Электронный каталог «Научные журналы АГУ» https://journal.asu.edu.ru/		
Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек. http://mars.arbicon.ru		
Справочная правовая система КонсультантПлюс. Содержится огромный массив справочной правовой информации, российское и региональное законодательство, судебную практику, финансовые и кадровые консультации, консультации для бюджетных организаций, комментарии законодательства, формы документов, проекты нормативных правовых актов, международные правовые акты, правовые акты, технические нормы и правила. http://www.consultant.ru		

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

7.1. Паспорт фонда оценочных средств

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) «Молекулярное моделирование» проверяется сформированность у обучающихся компетенций, указанных в разделе 3 настоящей программы. Этапность формирования данных компетенций в процессе освоения образовательной программы определяется последовательным освоением дисциплин (модулей) и прохождением практик, а в процессе освоения дисциплины (модуля) – последовательным достижением результатов освоения содержательно связанных между собой разделов, тем.

Таблица 6 – Соответствие разделов, тем дисциплины (модуля), результатов обучения по дисциплине (модулю) и оценочных средств

Контролируемый раздел, тема дисциплины (модуля)	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
Раздел 1. Методы расчета фундаментальных частот и интенсивностей спектров многоатомных молекул		

Контролируемый раздел, тема дисциплины (модуля)	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
<i>Тема 1. Общее уравнение состояния молекулы (уравнение Шредингера)</i>	ОПК-2	Индивидуальное собеседование
<i>Тема 2. Вероятность перехода</i>	ОПК-2	Индивидуальное собеседование
<i>Тема 3. Принципы решения колебательной задачи</i>	ОПК-2	Индивидуальное собеседование
Раздел 2. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул		
<i>Тема 1. Уравнения Гамильтона</i>	ОПК-2	
<i>Тема 2. Метрика естественной колебательной координаты</i>	ОПК-2	Индивидуальное собеседование
<i>Тема 3. Квантовые модели молекулярной динамики</i>	ОПК-2	Индивидуальное собеседование
Раздел 3. ИК-Фурье спектрометр Frontier		
<i>Тема 1. Вид установки</i>	ОПК-2	Индивидуальное собеседование
<i>Тема 2. Установка приставок</i>	ОПК-2	Индивидуальное собеседование
<i>Тема 3. Панели инструментов</i>	ОПК-2	Индивидуальное собеседование
<i>Тема 4. Возможности программного обеспечения</i>	ОПК-2	Индивидуальное собеседование
Раздел 4. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул на примере программы Gaussian		
<i>Тема 1. Ввод исходных данных для квантовых расчетов</i>	ОПК-2	Индивидуальное собеседование
<i>Тема 2. Пример решения задачи(фенол)</i>	ОПК-2	Индивидуальное собеседование
Раздел 5. Практическая часть		
<i>Тема 1. Исследование оптических свойств ядохимиката «Фитоверм» и биомолекул перца</i>	ОПК-2 ПК-2	Выполнение проекта
<i>Тема 2. Исследование оптических свойств биомолекул петрушки и яда «Алатар»</i>	ОПК-2 ПК-2	Выполнение проекта
<i>Тема 3. Исследование оптических свойств биомолекул томата и яда «Циткор»</i>	ОПК-2 ПК-2	Выполнение проекта
<i>Тема 4. Исследование оптических свойств биомолекул клубники и яда «Карбофос»</i>	ОПК-2 ПК-2	Выполнение проекта
<i>Тема 5. «Исследование оптических свойств биомолекул щавеля и яда «Фуфанон»</i>	ОПК-2 ПК-2	Выполнение проекта
<i>Тема 6. Исследование оптических свойств</i>	ОПК-2 ПК-2	Выполнение проекта

Контролируемый раздел, тема дисциплины (модуля)	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
<i>биомолекул чеснока и яда «Медный купорос»</i>		
<i>Тема 7. Изучение влияния музыкальных композиций на биокультуры растений (на примере мелиссы)»</i>	ОПК-2 ПК-2	Выполнение проекта
<i>Тема 8. Исследование оптических свойств баклажана «Мраморный» и яда «Фитоверм»</i>	ОПК-2 ПК-2	Выполнение проекта
<i>Тема 9. Изучение влияния ядохимикатов на биокультуры растений (на примере лука батуна)</i>	ОПК-2 ПК-2	Выполнение проекта
<i>Тема 10. Представление и защита проектной работы</i>	ОПК-2 ПК-2	Зачет

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания

Таблица 7 – Показатели оценивания результатов обучения в виде знаний

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует глубокое знание теоретического материала, умение обоснованно излагать свои мысли по обсуждаемым вопросам, способность полно, правильно и аргументированно отвечать на вопросы, приводить примеры
4 «хорошо»	демонстрирует знание теоретического материала, его последовательное изложение, способность приводить примеры, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует неполное, фрагментарное знание теоретического материала, требующее наводящих вопросов преподавателя, допускает существенные ошибки в его изложении, затрудняется в приведении примеров и формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	демонстрирует существенные пробелы в знании теоретического материала, не способен его изложить и ответить на наводящие вопросы преподавателя, не может привести примеры

Таблица 8 – Показатели оценивания результатов обучения в виде умений и владений

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует отдельные, несистематизированные навыки, испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, выполняет задание по подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке

Шкала оценивания	Критерии оценивания
	ВЫВОДОВ
2 «неудовлетворительно»	не способен правильно выполнить задания

7.3. Контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения по дисциплине (модулю)

Раздел 1. Методы расчета фундаментальных частот и интенсивностей спектров многоатомных молекул

Тема 1. Общее уравнение состояния молекулы (уравнение Шредингера)

1. Индивидуальное собеседование по вопросу:

- 1) Общее уравнение состояния молекулы - уравнения Шредингера;

Тема 2. Вероятность перехода

1. Индивидуальное собеседование по вопросам:

- 1) Гамильтониан.
- 2) Уравнения Гамильтона.
- 3) Описание состояния свободного электромагнитного поля излучения.
- 4) Молекула-поле.
- 5) Средняя скорость изменения вероятности перехода.

Тема 3. Принципы решения колебательной задачи

1. Индивидуальное собеседование по вопросам:

- 1) Координатное представление уравнения Шредингера;
- 2) Уравнение Шредингера для молекулы в пространстве импульсов электронов.

Раздел 2. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул

Тема 1. Уравнения Гамильтона

1. Индивидуальное собеседование по вопросам:

- 1) Математическая модель движения атомов.
- 2) Функция Гамильтона. Адиабатический потенциал молекулярного объекта.
- 3) Анггармоническое слагаемое.
- 4) Гармонические силовые постоянные.

Тема 2. Метрика естественной колебательной координаты

1. Индивидуальное собеседование по вопросам:

- 1) Определяющие для получения искомой Метрики.
- 2) Метрическое соотношение.

Тема 3. Квантовые модели молекулярной динамики

1. Индивидуальное собеседование по вопросам:

- 1) Адиабатический потенциал.
- 2) Первая модель. Вторая модель.

3) Вид обратной метрики, связывающая декартовые координаты с естественными координатами.

Раздел 3. ИК-Фурье спектрометр Frontier

Тема 1. Вид установки

1. Индивидуальное собеседование по вопросу:

1) Спектрометр и его характеристики.

Тема 2. Установка приставок

1. Индивидуальное собеседование по вопросу:

1) Алгоритм установки приставки.

Тема 3. Панели инструментов

1. Индивидуальное собеседование по вопросам:

- 1) Разновидность панелей инструментов.
- 2) Общие и локальные панели инструментов.

Тема 4. Возможности программного обеспечения

1. Индивидуальное собеседование по вопросам:

- 1) Измерение спектра фона.
- 2) Сканирование образца.
- 3) Спектральный калькулятор. Вырезать. Сравнить. Разность.

Раздел 4. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул на примере программы Gaussian

Тема 1. Ввод исходных данных для квантовых расчетов

1. Индивидуальное собеседование по вопросам:

- 1) Директивы процессора.
- 2) Спецификация задачи. Заголовок задачи.
- 3) Спецификация молекулы.
- 4) Заряд молекулы и ее мультиплетность.
- 5) Начальная геометрия молекулы.

Тема 2. Пример решения задачи (фенол)

1. Индивидуальное собеседование по вопросу:

1) Описание и разбор шагов решения задачи.

Раздел 5. Практическая часть

Тема 1. Исследование оптических свойств ядохимиката «Фитоверм» и биомолекул перца.

1. Выполнение проекта.

Тема: «Исследование оптических свойств ядохимиката «Фитоверм» и биомолекул перца»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 2. Исследование оптических свойств биомолекул петрушки и

яда «Алатар»

1. Выполнение проекта.

Тема: «Исследование оптических свойств биомолекул петрушки и яда «Алатар»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 3. Исследование оптических свойств биомолекул томата и яда «Циткор»

1. Выполнение проекта.

Тема: «Исследование оптических свойств биомолекул томата и яда «Циткор»»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 4. Исследование оптических свойств биомолекул клубники и яда «Карбофос»

1. Выполнение проекта.

Тема: «Исследование оптических свойств биомолекул клубники и яда «Карбофос»»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 5. «Исследование оптических свойств биомолекул щавеля и яда «Фуфанон»

1. Выполнение проекта.

Тема: ««Исследование оптических свойств биомолекул щавеля и яда «Фуфанон»»»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 6. Исследование оптических свойств биомолекул чеснока и яда «Медный купорос»

1. Выполнение проекта.

Тема: «Исследование оптических свойств биомолекул чеснока и яда «Медный купорос»»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 7. Изучение влияния музыкальных композиций на биокультуры растений (на примере мелиссы)»

1. Выполнение проекта.

Тема: «Изучение влияния музыкальных композиций на биокультуры растений (на примере мелиссы)»»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 8. Исследование оптических свойств баклажана «Мраморный» и яда «Фитоверм»

1. Выполнение проекта.

Тема: «Исследование оптических свойств баклажана «Мраморный» и яда «Фитоверм»»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 9. Изучение влияния ядохимикатов на биокультуры растений (на примере лука батун)

1. Выполнение проекта.

Тема: «Изучение влияния ядохимикатов на биокультуры растений (на примере лука батун)»

Примерный вид проектной работы и всё составляющее к ней (Цель. Оборудование, Краткая теория. Характеристические данные молекулы. Ход работы. Пример дневника наблюдений. Примеры спектров и таблиц данных. Анализ характеристических частот. Вывод).

Тема 10. Представление и защита проектной работы

1. Зачет

Таблица 9 – Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
ОПК-2 Способен осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ информации из различных источников и баз данных, представлять ее в требуемом формате с использованием информационных, компьютерных и сетевых технологий.				
1.	Задание закрытого типа	Виды движения в молекуле: а) электронное, колебательное, вращательное б) электрическое, колебательное, вращательное в) электронное, колебательное, поступательное	а	1
2.		Спектры излучения бывают: а) линейчатые, полосатые, сплошной б) непрерывный, линейчатый, полосатый в) поглощения, испускания, рассеяния	б	1
3.		Какие бывают типы молекулярных спектров? а) поглощения, испускания, рассеяния б) линейчатые, полосатые,	а	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		сплошной в) непрерывный, линейчатый, полосатый		
4.		Что такое волновая функция: а) отдельная функция, используемая в квантовой механике для описания состояния квантовомеханической системы б) комплексная функция, используемая в квантовой механике состояния термодинамической системы в) Комплексная функция, используемая в квантовой механике для описания состояния квантовомеханической системы.	в	1
5.		Кто предложил описать квантовую систему с помощью функции, которая описывала бы ее волновые свойства? а) Шредингер б) Фарадей в) Эйнштейн	а	
6.	Задание открытого типа	Какие общие панели инструментов включает в себя рабочая область Spectrum?	Панели инструментов Scan (Сканирование, измерение), а именно панели InstrumentSettings (Параметры, настройки прибора), Measurement (Измерение), Accessory (Приставка), Status (Состояние).	2
7.		Какие локальные панели инструментов включает в себя рабочая область Spectrum?	Область просмотра (ViewingArea) может включать следующие панели инструментов для графического изображения: Панель Graph (Графическое изображение), панель Process (Обработка).	2
8.		Как установить приставку?	1. Удалить крышку	3

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			кюветного отделения, если она установлена . 2. Для удаления приставки, установленной в кюветном отделении, переместить её синим маркером, находящимся под платой размещения приставки, на себя . 3. Установить новую приставку, для чего поставьте её на направляющие и продвинуть в кюветное отделение до упора. 4. Программное обеспечение Spectrum 100 автоматически Распознает установленную приставку.	
9.		Продолжите: «В качестве математической модели движения атомов, совершающих малые колебания относительно положения равновесия, принято использовать _____:»	уравнения Гамильтона	1
10.		Продолжите: « $H = T + U$ – функция _____»	Гамильтона	1
ПК-2 Способность проводить математическое моделирование процессов и объектов на базе стандартных пакетов автоматизированного проектирования и исследований.				
1.	Задание закрытого типа	Scan Background в программе – это ... а) Сканирование образца б) Спектральный калькулятор в) Измерение спектра фона	в	1
2.		Scan Sample в программе – это ... а) Измерение спектра фона б) Сканирование образца в) Спектральный калькулятор	б	1
3.		Где расположена панель Status по умолчанию?		1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		а) сверху рабочей области б) внизу рабочей области в) по середине рабочей области	б	
4.		Какую программу используют для расчета? а) ChemCraft б) КОМПАС - 3D в) Gaussian 03 Revision	в	1
5.		Какую программу используют для составления матрицы? а) ChemCraft б) КОМПАС - 3D в) Gaussian 03 Revision	а	1
6.	Задание открытого типа	Укажите шаги произведения расчетов с помощью спектрального калькулятора.	1. Выделить спектр или спектры, которые нужно подвергнуть расчетам. 2. Вывести на экран меню Process (обработка) и выбрать в нем Spectral Calculator (Спектральный калькулятор). 3. Для проведения расчетов использовать клавиши спектрального калькулятора.	2
7.		Как отсканировать образец?	1. Вывести на экран меню Instrument (прибор) и выбрать в нем Scan Sample (измерить спектр образца). 2. Установить нужные нам Scan Parameters (параметры сканирования) и Spectrum Details (детали спектра).	2
8.		Как сравнить спектр?	1. Вывести на экран и выбрать спектр, который нужно сравнить с эталонным спектром. 2. Вывести на экран меню Process (обработка) и выбрать	2

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			в нем команду Compare (сравнить). 3. Будет произведено сравнение спектров, результаты которого будут показаны на экране.	
9.		Как посчитать разность спектров?	1. Вывести на экран и выбрать два спектра, чью разность нужно рассчитать. 2. Вывести на экран меню Process (обработка) и выбрать в нем команду Difference (разность). 3. Выбрать нужный нам Factor (коэффициент).	2
10.		Как измерить спектр фона?	1. Вывести на экран меню Instrument (прибор) и выбрать в нем Scan Background (измерить спектр фона). Начнется диалог Scan Background (измерить спектр фона) 2. Нажать ОК. Начинается сканирование спектра	2

Полный комплект оценочных материалов по дисциплине (модулю) (фонд оценочных средств) хранится в электронном виде на кафедре, утверждающей рабочую программу дисциплины (модуля), и в Центре мониторинга и аудита качества обучения.

7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

Оценка достижений студентов строится на основе системы БАРС (Приказ ректора от 13.01.2014 г. № 08-01-01/08) ознакомиться с которой можно по ссылке http://asu.edu.ru/images/File/Ilil_5/ATT00072.pdf.

Таблица 10 – Технологическая карта рейтинговых баллов по дисциплине (модулю)

№ п/п	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий / баллы	Максимальное количество баллов	Срок представле ния
Основной блок				
1.	Контрольные вопросы	1/10	10	До зачета

№ п/п	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий / баллы	Максимальное количество баллов	Срок представления
2.	Выполнение практического задания (проект)	1/80	80	До зачета
Всего			90	-
Блок бонусов				
3.	Своевременное выполнение заданий	-	5	До зачета
4.	Своевременная загрузка материала в «Электронное образование»	-	5	До зачета
Всего			10	
ИТОГО			100	-

Таблица 11 – Система штрафов (для одного занятия)

Показатель	Балл
Опоздание на занятие	- 2
Нарушение учебной дисциплины	- 2
Неготовность к занятию	- 2
Пропуск занятия без уважительной причины	- 2
Не своевременное выполнение задания	- 2
Нарушение техники безопасности	- 1

При пересдаче зачета из рейтингового балла студента вычитается:

- первая пересдача – 5 баллов
- вторая пересдача – 10 баллов

Таблица 12 – Шкала перевода рейтинговых баллов в итоговую оценку за семестр по дисциплине (модулю)

Сумма баллов	Оценка по 4-балльной шкале	
90–100	5 (отлично)	Зачтено
85–89	4 (хорошо)	
75–84		
70–74		
65–69		
60–64	3 (удовлетворительно)	
Ниже 60	2 (неудовлетворительно)	Не зачтено

При реализации дисциплины (модуля) в зависимости от уровня подготовленности обучающихся могут быть использованы иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

8.1. Основная литература

1. Ахманов С.А., Физическая оптика [Электронный ресурс]: учебник / Ахманов С.А. - 2-е изд. - М. : Издательство Московского государственного университета,

2004. - 656 с. (Классический университетский учебник) - ISBN 5-211-04858-X - Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/5-211-04858-X.html> (ЭБС «Консультант студента»)

2. Грибов Л.А., Баранов В.И., Зеленцов Д.Ю. Электронно-колебательные спектры многоатомных молекул. Теория и методы расчета. Наука, Москва, 1997, - 475 с.

3. Серба П.В. Мирошеченко С.П., Блинов Ю.Ф. Квантово-химические расчеты в программе Gaussian учебное пособие по курсу «физика низкоразмерных структур», ФЭП, Таганрог, - 99 с.

4. Шагаутдинова И.Т., Лихтер А.М., Березин К.В. Сборник проектных заданий к спецкурсу «Оптические свойства биомолекул»: Учеб.пособие. – Астрахань: Изд-во АГУ, 2019 –98с.

8.2. Дополнительная литература

1. Волькенштейн М.В., Ельяшевич М.А., Степанов Б.И. Колебания молекул. -М.: ГИТТЛ. 1949 – 1200 с.

2. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. -М.: Иностран. лит., 1949. - 413 с.

3. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул.Изд. Феникс, 1997. -560с.

4. Тучин В.В., Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике [Электронный ресурс] / Тучин В.В. - М. : ФИЗМАТЛИТ, 2012. - 812 с. - ISBN 978-5-9221-1422-6 - Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922114226.html> (ЭБС «Консультант студента»)

8.3. Интернет-ресурсы, необходимые для освоения дисциплины (модуля)

1. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента»

Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретённым на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог содержит более 15 000 наименований изданий.

www.studentlibrary.ru

Регистрация с компьютеров АГУ

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Учебная и монографическая литература, научные статьи, натурные и компьютерные демонстрации, электронные лекции (презентации), мультимедиапроектор. Персональные компьютеры с программным обеспечением, состоящим из математических пакетов (Mathematica, Mathcad) специализированного пакета квантовой химии (Gaussian) систем программирования на языках высокого уровня (Фортран, Бейсик, Паскаль, СИ), графических редакторов (Origin, Gnuplot), текстовых редакторов. Лабораторные работы.

Рабочая программа дисциплины (модуля) при необходимости может быть адаптирована для обучения (в том числе с применением дистанционных образовательных технологий) лиц с ограниченными возможностями здоровья, инвалидов. Для этого требуется заявление обучающихся, являющихся лицами с ограниченными возможностями здоровья, инвалидами, или их законных представителей и рекомендации психолого-медико-педагогической комиссии. Для инвалидов содержание рабочей программы дисциплины (модуля) может определяться также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида (при наличии).

