

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

_____ С. А. Тишкова

«04» апреля 2024 г.

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой физики

_____ С. А. Тишкова

«04» апреля 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

«МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ»

Составитель(и)	Шагаутдинова И. Т., к.ф.-м.н., доцент кафедры физики
Направление подготовки / специальность	03.03.02 ФИЗИКА
Направленность (профиль) ОПОП	ИНЖЕНЕРНАЯ ФИЗИКА
Квалификация (степень)	бакалавр
Форма обучения	очная
Год приёма	2023
Курс	4
Семестр(ы)	7

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 *элективной части* и осваивается в 7 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, Mathematics), 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):

- физика реального кристалла
- физика конденсированного состояния, термодинамика, статистическая физика, физическая кинетика

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) профессиональной(ых) (ПК).

ПК-5. Способность применять профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин

Таблица 1 – Декомпозиция результатов обучения

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
ПК-5 Способность применять профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин.	ИПК-5.1.1 знать фундаментальные понятия, законы и теории, полученные при освоении профильных физических дисциплин	ИПК-5.2.1 уметь применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин	ИПК-5.3.1 владеть фундаментальными понятиями и законами, полученными при освоении профильных физических дисциплин

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Объём дисциплины (модуля) составляет 3 зачётные единицы, в том числе 52 часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (из них 26 часов – лекции, 26 часов – практические занятия), и 56 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 [по семестрам]
		Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
<i>Тема. 1.</i> Введение в дисциплину	7	2	2			8	Опрос
<i>Тема. 2.</i> Силовые поля.	7	4	4			8	Тест
<i>Тема. 3.</i> Программные пакеты молекулярного моделирования	7	4	4			8	Тест
<i>Тема. 4.</i> Минимизация потенциальной энергии	7	4	4			8	Опрос Тест
<i>Тема. 5.</i> Основы статистической термодинамики	7	4	4			8	Опрос Тест
<i>Тема. 6.</i> Молекулярная динамика	7	4	4			8	Опрос Тест

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Семестр	Контактная работа (в часах)			Самост. работа		Форма текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации [по семестрам]
		Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
Тема. 7. Особые условия в молекулярном моделировании	7	4	4			8	Опрос Тест
Итого		26	26			56	Зачёт

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

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

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Кол-во часов	Код компетенции	Общее количество компетенций
		ПК-5	
Тема. 1. Введение в дисциплину	12	+	1
Тема. 2. Силовые поля.	16	+	1
Тема. 3. Программные пакеты молекулярного моделирования	16	+	1
Тема. 4. Минимизация потенциальной энергии	16	+	1
Тема. 5. Основы статистической термодинамики	16	+	1
Тема. 6. Молекулярная динамика	16	+	1
Тема. 7. Особые условия в молекулярном моделировании	16	+	1
Итого	108		Зачет

Краткое содержание каждой темы дисциплины (модуля)

Тема. 1. Основные понятия и положения термодинамики.

Предмет Тема 1. Введение в дисциплину

Введение в дисциплину. Предмет курса. Основные понятия молекулярного моделирования. Единицы измерения в «молекулярном мире». Характерные единицы массы, энергии, времени. Число частиц в моделируемой молекулярной системе. Этапы развития молекулярного моделирования. Области применения молекулярного моделирования.

Тема 2. Силовые поля

Основные представления о силовых полях. Силовое поле AMBER. Функциональный вид взаимодействий. Невалентные взаимодействия: ван-дер-ваальсовы и кулоновские силы. Выбор атомных зарядов. Основы работы с пакетами программ моделирования методами молекулярной механики.

Тема 3. Программные пакеты молекулярного моделирования

Программные пакеты Chem Craft, GaussView. Отображение 3-мерных изображений молекул по декартовым координатам атомов, с возможностью просмотра или модификации любого геометрического параметра в молекуле (расстояния, угла); Различные средства для конструирования молекул и модификации молекулярной геометрии: использование стандартного набора молекулярных фрагментов, "перетаскивание" атомов или фрагментов с помощью мыши, придание молекуле требуемой симметрии, и другие возможности; Получение качественных 32-битных изображений молекул в различных графических стилях, содержащих требуемые обозначения (надписи, линии и др.), которые легко экспортируются в Word или другой текстовый редактор; Вспомогательные утилиты для подготовки входных файлов: визуальное конструирование Z-матрицы, автоматическая генерация блоков для входных файлов GAMESS и Gaussian с нестандартными базисными наборами.

Тема 4. Минимизация потенциальной энергии

Понятие о поверхности потенциальной энергии. Минимум, переходное состояние и интермедиа. Гессиант и его использование для характеристики точек. Глобальная и локальная минимизация геометрии. Алгоритмы локальной минимизации. Понятие о порядке минимизатора. Минимизаторы нулевого, первого и второго порядка. Метод симплексов и биекций. Метод следования градиенту, метод сопряженных градиентов. Метод Ньютона и Ньютона-Рафсона. Алгоритмы глобальной минимизации геометрии. Оптимизация геометрии молекулы.

Тема 5. Основы статистической термодинамики

Основные положения статистической термодинамики, их применение в молекулярном моделировании. Метод конформационного анализа Монте-Карло. Броуновская динамика. Оптимизация геометрии молекулы методом Монте-Карло.

Тема 6. Молекулярная динамика Динамика молекулярных систем. Уравнения движения: Ньютона, Лагранжа, Гамильтона. Молекулярная динамика. Численное интегрирование уравнений движения. Алгоритм Верле (простейшая разностная аппроксимация). Алгоритм с перескоками (Leapfrog алгоритм). Скоростной алгоритм Верле. Проведение моделирования методом молекулярной динамики.

Тема 7. Особые условия в молекулярном моделировании Ограничения, налагаемые на расчеты молекулярного моделирования для уменьшения сложности системы, а также для учета особых свойств системы: растворитель, протяженность, термодинамические характеристики. Представление растворителя

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

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

При проведении аудиторных занятий с целью формирования и развития профессиональных навыков, обучающихся используются следующие образовательные технологии:

- 1) технология обучения в сотрудничестве (индивидуальная работа, работа в парах, малых группах, коллективная деятельность);
- 2) технология развития рефлексии через диалог. Реализуется в процессе проведения практических занятий. К способам реализации данной технологии мы относим и использование разных типов интерактивного воздействия и взаимодействия на практических занятиях (работа в тройках «говорящий-слушающий-наблюдатель», работа в «аквариуме», работа в диадах);
- 3) реализация практических навыков в процессе обучения.

Практическое занятие должно опираться на известный теоретический материал, который изложен или на который дана соответствующая ссылка в лекции.

Практическое занятие должно быть нацеленным на формирование определенных умений и закрепления определенных навыков, поэтому цель занятия должна быть заранее известна и понятна преподавателю и обучающимся. Лучше иметь сформулированные в письменном виде цель, задачи, содержание и последовательность занятия, ожидаемый результат.

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины (модулю)

Рабочая программа дисциплины предназначена для самостоятельной работы студентов, но может быть использована и при проведении практических и лабораторных работ.

Учебно-методические материалы по подготовке практических занятий содержат планы проведения занятий с указанием рассматриваемых вопросов, описание лабораторных работ.

При подготовке к занятиям студенту необходимо изучить рекомендуемую литературу, ответить на контрольные вопросы. Одни из них требуют простого воспроизведения изученного материала, другие – творческого подхода к решению вопросов и задач. Для выполнения заданий необходимо изучить рекомендуемую литературу по данной теме. Систематическое выполнение заданий формирует навыки решения расчетных задач, умение работать с учебной и справочной литературой.

При подготовке к лабораторным работам студент должен повторить теоретические вопросы данной темы, составить в тетради описание работы, дополнить расчетами, выводами.

Таблица 4 – Содержание самостоятельной работы обучающихся

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Форма работы
<i>Тема. 1.</i> Введение в дисциплину	8	Изучение литературы Конспектирование изученных источников
<i>Тема. 2.</i> Силовые поля.	8	Изучение литературы Конспектирование изученных источников
<i>Тема. 3.</i> Программные пакеты молекулярного моделирования	8	Изучение литературы Конспектирование изученных источников
<i>Тема. 4.</i> Минимизация потенциальной энергии	8	Изучение литературы Конспектирование изученных источников
<i>Тема. 5.</i> Основы статистической термодинамики	8	Изучение литературы Конспектирование изученных источников
<i>Тема. 6.</i> Молекулярная динамика	8	Изучение литературы Конспектирование изученных источников
<i>Тема. 7.</i> Особые условия в молекулярном моделировании	8	Изучение литературы Конспектирование изученных источников, доклад

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

Требования к оформлению доклада.

Объем машинописного текста доклада должен быть рассчитан на произнесение доклада в течение 7 -10 минут (3-5 машинописных листа текста с докладом). Поэтому при подборе необходимого материала для доклада отбирается самое главное. В докладе должны быть кратко отражены главные моменты из введения, основной части и заключения. При подготовке конспекта доклада необходимо составить не только текст доклада, но и

необходимый иллюстративный материал, сопровождающий доклад (основные тезисы, формулы, схемы, чертежи, таблицы, графики и диаграммы, фотографии и т.п.).

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
<i>Тема. 1.</i> Введение в дисциплину	Лекция- диалог	Фронтальный опрос, решение задач	<i>Не предусмотрено</i>
<i>Тема. 2.</i> Силовые поля.	Лекция- диалог	Фронтальный опрос, решение задач	<i>Не предусмотрено</i>
<i>Тема. 3.</i> Программные пакеты молекулярного моделирования	Лекция- диалог	Фронтальный опрос, решение задач	<i>Не предусмотрено</i>
<i>Тема. 4.</i> Минимизация потенциальной энергии	Лекция- диалог	Фронтальный опрос, решение задач	<i>Не предусмотрено</i>
<i>Тема. 5.</i> Основы статистической термодинамики	Лекция- диалог	Фронтальный опрос, решение задач	<i>Не предусмотрено</i>
<i>Тема. 6.</i> Молекулярная динамика	Лекция- диалог	Фронтальный опрос, решение задач	<i>Не предусмотрено</i>
<i>Тема. 7.</i> Особые условия в молекулярном моделировании	Лекция- диалог	Фронтальный опрос, решение задач	<i>Не предусмотрено</i>

6.2. Информационные технологии

– использование электронных учебников и различных сайтов (например, электронных библиотек, журналов и т. д.) как источников информации таких как:

Единое окно доступа к образовательным ресурсам <http://window.edu.ru>

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации <https://minobrnauki.gov.ru>

Министерство просвещения Российской Федерации <https://edu.gov.ru>

Федеральное агентство по делам молодежи (Росмолодёжь) <https://fadm.gov.ru>

Федеральная служба по надзору в сфере образования и науки (Рособрнадзор) <http://obrnadzor.gov.ru>

Сайт государственной программы Российской Федерации «Доступная среда» <http://zhit-vmeste.ru>

Российское движение школьников <https://рдш.рф>

– использование возможностей электронной почты преподавателя;

– использование виртуальной обучающей среды LMS Moodle

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 10 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-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)	Программы для информационной безопасности

6.3.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

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.

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
<i>Тема. 1.</i> Введение в дисциплину	ПК-5	Опрос Тест
<i>Тема. 2.</i> Силовые поля.	ПК-5	Опрос Тест
<i>Тема. 3.</i> Программные пакеты молекулярного моделирования	ПК-5	Опрос Тест
<i>Тема. 4.</i> Минимизация потенциальной энергии	ПК-5	Опрос Тест
<i>Тема. 5.</i> Основы статистической термодинамики	ПК-5	Опрос Тест
<i>Тема. 6.</i> Молекулярная динамика	ПК-5	Опрос Тест
<i>Тема. 7.</i> Особые условия в молекулярном моделировании	ПК-5	Опрос Тест

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

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

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

Вопросы к зачету

1. Молекулярная динамика, ее механические и идейные основы;
2. Физическая природа потенциалов молекулярных взаимодействий и их функциональный вид;
3. Уравнения движения молекулярной системы. Их разностная аппроксимация;
4. Моделирование динамики конденсированных систем. Типы ансамблей.
5. Периодические граничные условия;
6. Алгоритм Верле (составление списка соседей) для вычисления невалентных взаимодействий;
7. Температура. Способы оценки и вычисления. Термостатирование молекулярной системы;
8. Учет растворителя. Явный и неявный учет растворителя;
9. Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена;
10. Моделирование биологических макромолекул. Основы подхода. Назначение моделирования;
11. Общая схема молекулярно-динамического вычислительного эксперимента;
12. Обработка траекторий молекулярной динамики. Временные и пространственные автокорреляционные функции.
13. Квантовые модели молекулярной динамики
14. Численные методы моделирования структуры многоатомных биомолекул на примере программы Gaussian.

Содержание практических занятий

1. Построение молекулы нитроэтана путем последовательного добавления атомов.
2. Построить молекулу 1,2-дихлорэтана. Определить: 1) длину связи C-C, 2) валентный угол Cl-C-C, 3) двугранный угол Cl-C-C-Cl.

3. Определение значений энтальпии активаций, энтальпии реакции для реакции элиминирования азотистой кислоты от молекулы нитроэтана в программном пакете «GaussView».
4. Построить молекулу 2,2-динитроэтилендиаммиака. В программе Gaussian09 провести расчет геометрических параметров и частот колебаний.
5. Для молекулы 2,2-динитроэтилендиаммиака рассчитать значения энтальпии, энергии Гиббса и энтропии.
6. Исследовать химической реакции радикального распада с использованием программы Gaussian09.
7. Исследовать нерадикальных реакций мономолекулярного распада нитроалканов в программе Gaussian09.
8. Рассчитать основных кинетических и термодинамических параметров химических реакций.
9. Использование процедуры сканирования поверхности потенциальной энергии при изучении механизма химической реакции.
10. Конформационный анализ молекулы 1,2 – дихлорэтана с использованием процедуры сканирования. Построить спектры.

Таблица 9 – Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
ПК-5. Способность применять профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин				
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, сплошной в) непрерывный, линейчатый, полосатый	а	1
4.		Что такое волновая функция: а) отдельная функция, используемая в квантовой		1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		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 квантово-механической системы.	в	
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	Длина волны резонансной линии серии Лаймана ($n_2=1$) $\lambda_{L\alpha} = 121.5$ нм, а длина волны границы серии Бальмера ($n_2=2$) $\lambda_{B\infty} = 365$ нм. Найти из этих данных потенциал ионизации атома Н.	13,6	3
7.		Координационное число равно шести для следующей структуры	простой кубической решетке	3
8.		Квант энергии тепловых колебаний решетки называется:	фононом	3
9.		Линейчатый спектр - это	Спектр, излучаемый свободными атомами	1
10.		Гибридизация - это	Смешивание орбиталей может происходить в отсутствие электронов на орбиталях и при наличии спаренных электронов на одной или нескольких орбиталях	1
11.	Задание комбинированного типа	Расшифруйте аббревиатуру физического явления «КР». В честь какого учёного названо данное явление? а) криволинейное рассеяние б) комбинационное разложение в) комбинационное рассеяние	в Данное явление также называется эффектом Рамана, в честь индийского ученого Ч. Рамана	3
12.		Кем был предложен квантовый метод, где многочастичная волновая функция является определителем одночастичных? Каковы недостатки данного метода? а) Шредингером и Борном б) Хартри и Фоком в) Бекке и Парром	б Метод Хартри-Фока не учитывает электронную корреляцию, что приводит к завышенным значениям энергии системы, игнорирует мгновенные взаимодействия между электронами.	3

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)

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

№ п/п	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий / баллы	Максимальное количество баллов	Срок представления
Основной блок				
1.	<i>Ответ на занятии</i>	8/3	24	В течение семестра
2.	<i>Выполнение лабораторных работ</i>	10/6	60	В течение семестра
3.	<i>Тетрадь с ЛР</i>	1/6	6	В конце семестра
Всего			90	-
Блок бонусов				
4.	<i>Посещение занятий</i>		5	
5.	<i>Своевременное выполнение всех заданий</i>		5	
Всего			10	-
ИТОГО			100	-

Таблица 11 – Система штрафов (для одного занятия)

Показатель	Балл
<i>Опоздание на занятие</i>	-1
<i>Нарушение учебной дисциплины</i>	-1
<i>Неготовность к занятию</i>	-2
<i>Пропуск занятия без уважительной причины</i>	-2

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	3 (удовлетворительно)	
60–64		
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. Хельтье, Х. -Д. Молекулярное моделирование : теория и практика / Х. -Д. Хельтье, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс; пер. с англ. - 5-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 322 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-724-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001017240.html>
2. Юрчук, С. Ю. Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур : моделирование наносистем методами молекулярной динамики / С. Ю. Юрчук - Москва : МИСиС, 2013. - 47 с. - ISBN 978-5-87623-663-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785876236630.html>
3. Кручинин, Н. Ю. Метод функционала плотности для расчета свойств молекул и твердых тел : учебное пособие / Кручинин Н. Ю. - Оренбург : ОГУ, 2017. - 128 с. - ISBN 978-5-7410-1739-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785741017395.html>
4. Каплан, И. Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / И. Г. Каплан; пер. с англ. - 4-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2023. - 397 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-93208-648-3. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785932086483.html>

8.2. Дополнительная литература

1. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В. Г. Цирельсон - Москва : Лаборатория знаний, 2025. - ISBN 978-5-93208-518-9. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785932085189.html>
2. Лупейко, Т. Г. Введение в общую химию : учебник. / Лупейко Т. Г. - Ростов н/Д : Изд-во ЮФУ, 2010. - 232 с. - ISBN 978-5-9275-0763-4. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785927507634.html>
3. Горбунов, Д. Е. Практические занятия по квантовой химии : учеб. пособие / Д. Е. Горбунов, Н. П. Грицан, В. Г. Киселев. - Новосибирск : РИЦ НГУ, 2022. - 40 с. - ISBN 978-5-4437-1335-9. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785443713359.html>

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

Электронная библиотечная система IPRbooks www.iprbookshop.ru
 Электронно-библиотечная система VOOK.ru <https://book.ru>
 Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех» <https://biblio.asu.edu.ru>. Учётная запись образовательного портала АГУ.
 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)

Аудитория для проведения занятий по курсу с доской и мультимедией.

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).