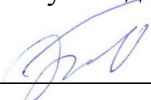


МИНОБРНАУКИ РОССИИ

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.Г. Тырков
«_24_» __ января __ 2025__ г.

СОГЛАСОВАНО
Заведующий кафедрой

_____ Л.А. Джигола
«_24_» __ января __ 2025__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«КВАНТОВАЯ ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Составитель

**Золотарева Н.В., к.т.н., доцент,
доцент кафедры ХМ**

Направление подготовки / специальность

04.03.01 ХИМИЯ

Направленность (профиль) ОПОП

ХИМИЯ

Квалификация (степень)

Бакалавр

Форма обучения

очная

Год приема

2023

Курс

3

Семестр

5

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Целью освоения дисциплины “Квантовая экологическая химия” является знакомство студентов с теоретическими основами квантовой экологической химии и ее возможностями для решения экологических проблем химии.

1.2. Задачи освоения дисциплины “Квантовая экологическая химия”: знакомство с ключевыми понятиями и постулатами квантовой механики, существующими методами решения базового стационарного уравнения Шредингера одно- и многоэлектронных систем, схемами, алгоритмами вычисления структурных и спектроскопических характеристик, методами предсказания реакционной способности молекул, вычислительными квантово-химическими программами.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина “Квантовая экологическая химия” к части, формируемой участниками образовательных отношений и осваивается в 5 семестре. Дисциплина встраивается в структуру ОПОП ВО как с точки зрения преемственности содержания, так и с точки зрения непрерывности процесса формирования компетенций выпускника.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы следующие знания, умения и навыки, формируемые предшествующими учебными дисциплинами:

- «Математика»

Знания: представления о функциях одной и нескольких переменных; статистическая обработка данных;

Умения: решение систем линейных и нелинейных уравнений; построение корреляционных зависимостей;

Навыки: осуществлять интегрирование и дифференцирование функций; решения дифференциальных уравнений; обработка экспериментальных данных.

- «Физика»

Знания: основные физические свойства света, волны; законы оптики; законов классической механики;

Умения: решать фундаментальные задачи;

Навыки: обработки данных, формирования выводов, постановка экспериментов.

- «Информатика»

Знания: представлениями об устройстве компьютера; о функционировании системного и прикладного программного обеспечения;

Умения: работать с прикладным программным обеспечением;

Навыки: работы с пользовательскими программными комплексами.

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

- Основы биогеохимии и экологической геохимии;

- Средства и методы обеспечения экологической безопасности.

Данный курс является базой для изучения активности и реакционной способности газов-поллютантов техногенного происхождения, применения вычислительных методов в прогнозировании свойств исходных веществ и продуктов взаимодействий.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

б) профессиональных (ПК):

«ПК-2» - Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности.

Таблица 1 – Декомпозиция результатов обучения

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
ПК-2	<p><i>ИПК-2.1.1</i> Использует базовые знания в квантовой теории при описании поведения атомов в молекуле и прогнозе реакционной способности.</p> <p><i>ИПК-2.1.2</i> методы, алгоритмы постановки вычислительного эксперимента, а также способы обработки результатов.</p> <p><i>ИПК-2.1.3</i> Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности.</p>	<p><i>ИПК-2.2.1</i> использовать терминологию и основные понятия направлений.</p> <p><i>ИПК-2.2.2</i> анализировать результаты экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.</p> <p><i>ИПК-2.2.3</i> Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик.</p>	<p><i>ИПК-2.3.1</i> Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений</p> <p><i>ИПК-2.3.2</i> способами систематизации и анализа результатов наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.</p> <p><i>ИПК-2.3.3</i> Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.</p>

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет **4 зачетных единицы**, в том числе 54 часа, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (из них по видам учебных занятий в соответствии с учебным планом 18 часов – лекции, 36 часов – практических занятий), и 90 часов – на самостоятельную работу обучающихся.

Таблица 2 – Структура и содержание дисциплины

Раздел, тема дисциплины	Семестр	Контактная работа (в часах)			Самостоятельная работа		Форма текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации
		Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
РАЗДЕЛ 1. Введение в экологическую химию							
Тема 1.1 Концепции и критерии воздействия химических веществ на окружающую среду	5	1	2			2	Дискуссия: семинар №1
Тема 1.2 Общие вопросы токсикологии.	5	1	2			2	Дискуссия: семинар №2

Тема 1.3 Токсическое воздействие веществ на экосистемы	5	1	2			2	Дискуссия: семинар №3
Тема 1.4 Принципы оценки токсичности веществ	5	1	2			6	Дискуссия: семинар №4
Тема 1.5 Органические и неорганические токсиканты	5	1	4			8	Дискуссия: семинар №5
РАЗДЕЛ 2. Реализация экологических задач современными квантово-химическими методами							
Тема 2.1 Программное квантово-химическое обеспечение	5	1	4			10	Дискуссия: семинар №6
Тема 2.2 Компьютерная реализация квантово-химических методов	5	1	4			12	Дискуссия: семинар №7
РАЗДЕЛ 3. Корреляционные зависимости между электронной структурой и реакционной способностью рассматриваемого объекта							
Тема 3.1 Химическая реакционная способность молекул	5	2	4			12	Отчет по вычислительному практикуму; Задачи для самоподготовки
Тема 3.2 Квантово-химическое описание реакций	5	2	4			12	Отчет по вычислительному практикуму; Задачи для самоподготовки
РАЗДЕЛ 4. Моделирование процессов взаимодействия химических веществ с биологическими системами							
Тема 4.1 Проведение диагностики молекул с использованием квантово-химических методов исследования	5	3	4			12	Отчет по вычислительному практикуму
Тема 4.2 Моделирование межмолекулярных взаимодействий	5	4	4			12	Отчет по вычислительному практикуму
ИТОГО		18	36			90	ЭКЗАМЕН

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

Таблица 3 - Матрица соотношения разделов, тем учебной дисциплины и формируемых компетенций

Разделы, темы дисциплины	Кол-во часов	Компетенции	Общее количество компетенций
		ПК-2	
РАЗДЕЛ 1. Введение в экологическую химию			
Тема 1.1 Концепции и критерии воздействия химических веществ на окружающую среду	5	+	1
Тема 1.2 Общие вопросы токсикологии.	5	+	1
Тема 1.3 Токсическое воздействие веществ на экосистемы	5	+	1
Тема 1.4. Принципы оценки токсичности веществ	9	+	1
Тема 1.5 Органические и неорганические токсиканты	13	+	1
РАЗДЕЛ 2. Реализация экологических задач современными квантово-химическими методами			
Тема 2.1 Программное квантово-химическое обеспечение	15	+	1

Тема 2.2 Компьютерная реализация квантово-химических методов	17	+	1
РАЗДЕЛ 3. Корреляционные зависимости между электронной структурой и реакционной способностью рассматриваемого объекта			
Тема 3.1 Химическая реакционная способность молекул	18	+	1
Тема 3.2 Квантово-химическое описание реакций	18	+	1
РАЗДЕЛ 4. Моделирование процессов взаимодействия химических веществ с биологическими системами			
Тема 4.1 Проведение диагностики молекул с использованием квантово-химических методов исследования	19	+	1
Тема 4.2 Моделирование межмолекулярных взаимодействий	20	+	1
Итого	144		

Краткое содержание каждой темы дисциплины

РАЗДЕЛ 1. Введение в экологическую химию

§1.1 Концепции и критерии воздействия химических веществ на окружающую среду

Экотоксикология, определение и задачи. Молекулярно-биологическое воздействие. Мутагенность и канцерогенность. Основные критерии возникновения мутагенеза (канцерогенеза) под действием химических веществ. Воздействие на поведение организмов. Модели оценки токсических воздействий.

§1.2 Общие вопросы токсикологии

Клеточные мембраны. Транспорт веществ. Модель элементарной мембраны. Жидкостно-мозаичная модель. Энергетика пассивного и активного транспорта. Перенос веществ через биологические мембраны с помощью переносчиков. Основные структурные особенности ионофоров. Катионная селективность ионофоров. Динамика комплексообразования с ионофорами. Антибиотики-каналообразователи. Основы действия токсикантов на биологические структуры.

§1.3 Токсическое воздействие веществ на экосистемы

Химическое загрязнение атмосферы. Техногенные выбросы в атмосферу. Озон и озоновый слой в атмосфере. Взвешенные в воздухе токсичные частицы. Химическое загрязнение природных вод. Неорганические загрязнители. Органические загрязнители. Сброс отходов в море с целью захоронения (дампинг). Загрязнение почвы. Кислые атмосферные загрязнители. Связь между строением веществ и их токсичностью. Действие токсикантов на ферментные системы. Прямое воздействие токсикантов на ферменты. Блокирование атомов металлов и цитохромов. Блокирование тиоловых и дитиоловых групп. Воздействие по типу «летального синтеза». Блокирование синтеза белка. Повреждение желез внутренней секреции. Механизмы гемолиза. Блокирование сульфгидрильных групп. Ферментативные нарушения в эритроцитах. Нарушение систем, регулирующих уровень пероксида водорода в эритроцитах. Примахиновый гемолиз. Механизмы метгемоглобинообразования. Воздействие фенолов на живые организмы. Биохимические основы действия фенолов на структурные элементы живых организмов.

§1.4 Принципы оценки токсичности веществ

Критерии и концепции оценки вещества. Экспозиция (доза воздействия веществ). Биологическое воздействие химических продуктов. Оценки опасности и риска. Оценка химических продуктов с помощью экотоксикологического профильного анализа.

§1.5 Органические и неорганические токсиканты

Поступление в окружающую среду и содержание токсикантов в природных средах. Поведение в окружающей среде и модельных системах. Токсикологические исследования. Нормы и дозы при различном поступлении в организм. Биологическое действие. Зависимость кожно-раздражающего действия токсикантов и его пороговая концентрация. Действие токсикантов на органы и системы органов. Органические соединения: бромбифенилы, винилхлорид, 1,1-дихлорэтилен, диоксины и родственные им соединения, микотоксины и его производные, изопропаноламины и др.; органические красители; поверхностно-активные вещества и их композиты, синтетические моющие средства; витамины; терпены, различные группы антибиотиков (пенициллин, тетрациклин, блеомицин) и др. Неорганические соединения: оксиды серы, азота, сероводород, цианиды, окислители и др.

РАЗДЕЛ 2. Реализация экологических задач современными квантово-химическими методами

§2.1 Программное квантово-химическое обеспечение

Обзор современного программного обеспечения квантово-химических расчетов, программные комплексы — GAMESS, MOPAC, MaSK. Пользовательский интерфейс программ. Редактирование структурных химических формул в программах визуализаторах. Обзор важнейших элементов главной панели, контрольной панели. Создание 2D и 3D эскиза молекулы. Редактирование связей и атомов. Элементы управления молекулами (перемещение, вращение, увеличение, уменьшение) относительно координатной оси. Редактирование и анализ геометрии трехмерных моделей молекул. Визуализация молекулярных структур. Создание и редактирование молекулярных моделей. Определение геометрических параметров молекулярной модели. Измерение связей, углов, торсионных углов и несвязанных атомов. Определение характеристик атомов. Использование собственных настроек параметров свойств.

§2.2 Компьютерная реализация квантово-химических методов расчета

Квантово-химический расчёт. MOPAC для проведения полуэмпирических расчётов различных молекул. Запуск программы. Расшифровка результатов расчёта. Составление z-матрицы молекул. Оптимизация геометрии различных молекул полуэмпирическими методами (AM1, PM3, PM7). Оценка точности зарядового распределения полуэмпирическими методами на основании расчётов дипольного момента. Оценка центров нуклеофильной и электрофильной атаки молекул. Использование неэмпирических методов (HF/STO-3G, HF/6-31G*, MP2, DFT/B3LYP и др.) для исследования геометрических параметров молекулы.

§2.3 Современные квантово-химические методы

Общая характеристика методов квантовой химии. Неэмпирическая квантовая химия. Базисные функции для неэмпирических расчетов. Методы теории функционала плотности. Полуэмпирические методы расчета. Основные требования к полуэмпирическим методам. Принципы параметризации полуэмпирических методов. Расширенный метод Хюккеля. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Точность квантово-химических расчетов химических свойств молекул.

РАЗДЕЛ 3. Корреляционные зависимости между электронной структурой и реакционной способностью рассматриваемого объекта

§3.1 Химическая реакционная способность молекул

Статический метод Коулсона и Лонге-Хиггинса. Метод граничных молекулярных орбиталей Фукуи. Динамический метод. Приближение Уэланда для переходного

состояния реакции. Метод оценки энергии локализации Лонге-Хиггинса и Дьюара. Индексы реакционной способности. Правило Вудворда-Хоффмана и его применение для оценки реакционной способности органических соединений.

§3.2 Квантово-химическое описание реакций

Химические реакции в газовой фазе. Поверхность потенциальной энергии химической реакции. Теория переходного состояния. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции. Особые точки равновесных и переходных состояний. Путь химической реакции, координата реакции. Квантово-химическое описание химических реакций в жидкой и твердой фазе. Молекулярный электростатический потенциал. Абсолютная жесткость и абсолютная мягкость молекулярных систем. Энергия диссоциации химической связи в молекулярной системе. Орбитальные модели взаимодействия молекул с поверхностью. Хемосорбция. Квантовая химия каталитических реакций.

РАЗДЕЛ 4. Моделирование процессов взаимодействия химических веществ с биологическими системами

§4.1 Проведение диагностики молекул с использованием квантово-химических методов исследования

Составление молекулярных диаграмм с применением метода молекулярных орбиталей для несложных молекул и предсказания их реакционной способности. Нахождение порядка связи, индекса свободной валентности, распределения зарядов ряда химических соединений. Проведение расчетов с помощью программных квантово-химических методов исследования. Сравнительная характеристика параметров, рассчитанных с помощью метода ЛКАО и программным методом.

§4.2 Моделирование межмолекулярных взаимодействий

Анализ энергетических и геометрических отклонений в параметрах структур, в зависимости от вида межмолекулярного взаимодействия, на примере систем (диоксид серы, сероводород, фенол, аммиак, оксиды азота) – модельные биологические мембраны (углеводы, n-пептиды, фосфолипиды и др.). Низкомолекулярные фрагменты в качестве моделей белковых систем: природные трипептиды, тетрапептиды, пентапептиды и др. Глутатион. Моделирование контактных межмолекулярных взаимодействий токсикантов (органического и неорганического происхождения) на модельных структурных компонентах клеточной мембраны. Сравнение результатов теоретических исследований с экспериментальными или справочными данными.

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ПРЕПОДАВАНИЮ И ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

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

Преподаватель должен активно непосредственно участвовать в учебном процессе и проводить подготовку к нему. Необходимость постоянной подготовки к лекциям, семинарским и практическим занятиям обусловлена потребностью отражать современные подходы, взгляды, данные по темам и разделам. Проводя подготовку к учебному процессу необходимо изучать современные методические рекомендации, результаты научных исследований, новые технологии и т.д. При реализации различных видов учебной работы преподаватель должен использовать образовательные технологии: создание интерактивных презентаций, обучающие компьютерные программы, технологии развития мышления (эффективная лекция, таблицы, работа в группах и т.д.)

В ходе подготовки лекции преподаватель должен разрабатывать план лекции, в котором должен определить те основные материалы, которые слушатели должны понять и записать. Содержание лекции должно быть организованным и четким, что делает усвоение материала доступным. Содержание лекции должно отвечать следующим требованиям: изложение материала от простого к сложному; от известного к неизвестному; логичность, четкость и ясность в изложении материала; возможность проблемного изложения; дискуссии и диалога в конце лекции с целью активизации деятельности слушателей; опора смысловой части лекции на подлинные факты, события, явления, статистические данные; тесная связь теоретических положений и выводов с практикой и профессиональной деятельностью. В ходе лекционного занятия преподаватель должен четко озвучить тему, представить план, кратко изложить цель, учебные вопросы. Раскрывая содержание учебных вопросов, акцентировать внимание на основных категориях, явлениях и процессах, особенностях их протекания. Следует также раскрывать сущность и содержание различных точек зрения и научных подходов к объяснению тех или иных явлений и процессов. При изложении лекционного материала следует аргументировано обосновать собственную позицию по спорным теоретическим вопросам, приводя примеры, раскрывать положительный отечественный и зарубежный опыт. По ходу изложения, возможно, задавать риторические вопросы и самому давать на них ответ. Преподаватель в целом не должен отвлекаться от излагаемого материала лекции. Преподаватель должен руководить работой слушателей по конспектированию лекционного материала, подчеркивать необходимость отражения в конспектах основных положений изучаемой темы. Используемый во время лекции наглядный материал – слайды, таблицы, схемы, иллюстрации помогает вести конспекты и улучшает темп предложения материала лекций. В заключительной части лекции необходимо сформулировать общие выводы по теме, раскрывающие содержание всех вопросов, поставленных в лекции. Для закрепления материала, подготовки к семинарским и практическим занятиям и выполнения самостоятельной работы необходимо рекомендовать литературу, основную и дополнительную, в том числе учебно-методические материалы, а также электронные источники (Интернет-ресурсы).

Во время практических и семинарских занятий используются словесные методы обучения, как беседа и дискуссия, что позволяет вовлекать в учебный процесс всех слушателей и стимулирует творческий потенциал обучающихся. Преподавателю необходимо иметь, для проведения практических и семинарских занятий, наглядные пособия – наборы таблиц по теме занятия, схемы и др. При подготовке к практическим и семинарским занятиям преподавателю необходимо знать план его проведения, продумать формулировки и содержание учебных вопросов, выносимых на обсуждение, познакомиться с новыми публикациями по теме. В начале занятия преподаватель должен раскрыть теоретическую и практическую значимость темы занятия, определить порядок его проведения, время на обсуждение каждого учебного вопроса. В ходе занятия следует дать возможность выступить всем желающим и предложить выступить тем слушателям, которые проявляют пассивность. Целесообразно, в ходе обсуждения учебных вопросов, задавать выступающим и аудитории дополнительные и уточняющие вопросы с целью выяснения их позиций по существу обсуждаемых проблем, а также поощрять выступление с места в виде кратких дополнений. В заключительной части практического занятия следует подвести итог: дать объективную оценку выступления слушателя и учебной группы в целом, раскрыть положительные стороны и недостатки проведения занятия, ответить на вопросы, назвать тему очередного занятия и дать необходимые задания.

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине:

1. Исидоров В.А. Экологическая химия: учеб. пособ. для вузов ... спец. "Охрана окружающей среды и рациональное использование природных ресурсов". - СПб.: Химиздат, 2001. - 304 с.
2. Золотарева Н.В. Основы квантовой механики в вопросах и задачах. Модельные примеры квантовой химии: Учебно-методическое пособие. – Астрахань: Издатель: Сорокин Роман Васильевич, 2020. – 58 с. (Электронный вариант <https://biblio.asu-edu.ru/>)
3. Золотарева Н.В. Молекулы и модели: теория и практика <https://stepik.org/course/143494>
4. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособ. для студентов вузов ... по химическим специальностям. - М.: Академия, 2008. - 384 с.
5. Фелленберг Г. Загрязнение природной среды. Введение в экологическую химию - М.: Мир, 1997. - 232 с.
6. Ложниченко О.В. Экологическая химия: учебное пособие для вузов / О.В. Ложниченко, И.В. Волкова, В.Ф. Зайцев – М.: Академия, 2008. 272 с.
7. Колок А., Современные яды: Дозы, действие, последствия [Электронный ресурс] / Колок А. - М.: Альпина Паблишер, 2017.-215с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785961458688.html>
8. Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы - М.: Лаборатория знаний, 2017. - 397 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015031.html>
9. Калетина Н.И. Токсикологическая химия. Метаболизм и анализ токсикантов - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2008. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970406137.html>
10. Калетина Н.И. Токсикологическая химия. Ситуационные задачи и упражнения / Н. И. Калетина - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2007. - 352 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970405406.html>
11. Колок А. Современные яды: Дозы, действие, последствия / Колок А. - М.: Альпина Паблишер, 2017. - 215 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785961458688.html>
12. Плетенёва Т.В., Токсикологическая химия [Электронный ресурс] / "Плетенева Т.В., Сыроешкин А.В., Максимова Т.В.; Под ред. Т.В. Плетенёвой" – М.: ГЭОТАР-Медиа, 2013.-512с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970426357.html>
13. С.А. Еремин и др. Токсикологическая химия. Аналитическая токсикология: учебник / Еремин С.А., Калетин Г.И., Калетина Н.И. и др. - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2010. - 752 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970415375.html>

Таблица 4 – Содержание самостоятельной работы обучающихся

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Форма работы
РАЗДЕЛ 1. Введение в экологическую химию		
Тема 1.1 Концепции и критерии воздействия химических веществ на окружающую среду Основные критерии возникновения мутагенеза (канцерогенеза) под действием химических веществ. Воздействие на поведение организмов. Модели оценки токсических воздействий.	2	Проработка дискуссионных вопросов к семинару №1
Тема 1.2 Общие вопросы токсикологии. Основные структурные особенности ионофоров. Катионная селективность ионофоров. Динамика	2	Проработка дискуссионных вопросов к семинару №2

комплексобразования с ионофорами. Антибиотики-каналообразователи. Основы действия токсикантов на биологические структуры.		
Тема 1.3 Токсическое воздействие веществ на экосистемы Действие токсикантов на ферментные системы. Прямое воздействие токсикантов на ферменты. Блокирование атомов металлов и цитохромов. Блокирование тиоловых и дитиоловых групп. Воздействие по типу «летального синтеза». Блокирование синтеза белка. Повреждение желез внутренней секреции. Механизмы гемолиза. Блокирование сульфгидрильных групп. Ферментативные нарушения в эритроцитах. Нарушение систем, регулирующих уровень пероксида водорода в эритроцитах. Примахиновый гемолиз. Механизмы метгемоглобинообразования. Воздействие фенолов на живые организмы. Биохимические основы действия фенолов на структурные элементы живых организмов.	2	Проработка дискуссионных вопросов к семинару №3
Тема 1.4 Принципы оценки токсичности веществ Оценки опасности и риска. Оценка химических продуктов с помощью экотоксикологического профильного анализа.	6	Проработка дискуссионных вопросов к семинару №4
Тема 1.5 Органические и неорганические токсиканты Действие токсикантов на органы и системы органов. Органические соединения: бромбифенилы, винилхлорид, 1,1-дихлорэтилен, диоксины и родственные им соединения, микотоксины и его производные, изопропаноламины и др.; органические красители; поверхностно-активные вещества и их композиты, синтетические моющие средства; витамины; терпены, различные группы антибиотиков (пенициллин, тетрациклин, блеомицин) и др. Неорганические соединения: оксиды серы, азота, сероводород, цианиды, окислители и др.	8	Проработка дискуссионных вопросов к семинару №5
РАЗДЕЛ 2. Реализация экологических задач современными квантово-химическими методами		
Тема 2.1 Программное квантово-химическое обеспечение. Редактирование и анализ геометрии трехмерных моделей молекул. Визуализация молекулярных структур. Создание и редактирование молекулярных моделей. Определение геометрических параметров молекулярной модели. Измерение связей, углов, торсионных углов и несвязанных атомов. Определение характеристик атомов. Использование собственных настроек параметров свойств.	10	Проработка дискуссионных вопросов к семинару №6
Тема 2.2 Компьютерная реализация квантово-химических методов Общая характеристика методов квантовой химии. Неэмпирическая квантовая химия. Базисные функции для неэмпирических расчетов. Методы теории функционала плотности. Полуэмпирические методы расчета. Основные требования к полуэмпирическим методам. Принципы параметризации полуэмпирических методов. Расширенный метод Хюккеля. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Точность квантово-химических расчетов химических свойств молекул.	12	Проработка дискуссионных вопросов к семинару №7

РАЗДЕЛ 3. Корреляционные зависимости между электронной структурой и реакционной способностью рассматриваемого объекта		
Тема 3.1 Химическая реакционная способность молекул Индексы реакционной способности. Правило Вудворда-Хоффмана и его применение для оценки реакционной способности органических соединений.	12	Оформление отчета по вычислительному практикуму №1 Решение задач для самоподготовки
Тема 3.2 Квантово-химическое описание реакций Квантово-химическое описание химических реакций в жидкой и твердой фазе. Молекулярный электростатический потенциал. Абсолютная жесткость и абсолютная мягкость молекулярных систем. Энергия диссоциации химической связи в молекулярной системе. Орбитальные модели взаимодействия молекул с поверхностью. Хемосорбция. Квантовая химия каталитических реакций.	12	Оформление отчета по вычислительному практикуму №2 Решение задач для самоподготовки
РАЗДЕЛ 4. Моделирование процессов взаимодействия химических веществ с биологическими системами		
Тема 4.1 Проведение диагностики молекул с использованием квантово-химических методов исследования Нахождение порядка связи, индекса свободной валентности, распределения зарядов ряда химических соединений.	12	Оформление отчета по вычислительному практикуму №3 Подготовка к Вопросам дискуссии
Тема 4.2 Моделирование межмолекулярных взаимодействий Анализ энергетических и геометрических отклонений в параметрах структур, в зависимости от вида межмолекулярного взаимодействия, на примере систем (диоксид серы, сероводород, фенол, аммиак, оксиды азота) – модельные биологические мембраны (углеводы, п-пептиды, фосфолипиды и др.). Низкомолекулярные фрагменты в качестве моделей белковых систем: природные трипептиды, тетрапептиды, пентапептиды и др.	12	Оформление отчета по вычислительному практикуму №4

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

Необходимым условием успешного усвоения дисциплины является систематический текущий контроль знаний студентов в течение всего семестра, который осуществляется в форме мини-опросов по основным модулям курса при отчете вычислительного практикума в течение всего семестра. При необходимости студентами могут быть подготовлены презентации (сообщения) при выполнении самостоятельных задач вычислительного практикума на ПК.

Оформление презентации: Формат: *.ppt, классический макет. Шрифт: 16, Times New Roman. Не допускаются отсканированные встроенные графики и рисунки низкого разрешения. Подготовленная презентация должна полностью или частично раскрывать материал. В презентацию должны быть включены следующие положения:

- актуальность темы;
- введение в базовую терминологию;
- обзор информации по изучаемой теме, проблеме (в случае проблемных задач);
- ключевые критерии, положения, модельные задачи;
- техническое выполнение заданий по изучаемой теме;
- выводы и прогнозы.

Выполнение заданий вычислительного практикума:

Работа по вычислительному практикуму выполняется в минигруппах за компьютерами. Отчет по индивидуальным заданиям вычислительного эксперимента на ПК оформляется в электронном виде в формате *****.doc** или *****.docx**. Выравнивание текста по ширине. Шрифт Times New Roman. Размер 12. Параметры страницы соответствуют: верхнее 2см, нижнее 2см, левое 2см, правое 2см. Студенты отчитываются индивидуально по выполненной работе.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При реализации различных видов учебной работы по дисциплине возможно применение электронного обучения и дистанционных образовательных технологий. В соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки реализация компетентностного подхода предусматривает использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (компьютерное моделирование при реализации вычислительного практикума, разбор конкретных модельных ситуаций во внеурочной работе) с целью формирования и развития требуемых компетенций обучающихся.

В рамках учебного курса предусмотрены открытые видеоконференции, лекции и мастер-классы с представителями других ВУЗов с целью получения новых умений в рамках изучаемой дисциплины.

6.1. Образовательные технологии

С целью формирования и развития профессиональных навыков у обучающихся в учебном процессе по дисциплине “Квантовая экологическая химия” предусмотрены следующие активные и интерактивные формы проведения лабораторных занятий:

- обучающие компьютерные программы по профилю подготовки, а также знакомство с электронными базами данных.
- работа в минигруппах с применением компьютерных технологий (работа на ПК);
- мини-опросы по текущей теме.

Учебные занятия по дисциплине проводятся с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) интерактивном взаимодействии обучающихся и преподавателя в режимах on-line и/или off-line в формах: видеоконференции, «вопрос-ответ» в режиме чата, форума, выполнения практических и/или лабораторных работ и др.

Таблица 5 – Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практическое занятие, семинар	Лабораторная работа
Раздел I. Введение в экологическую химию			
Тема 1.1 Концепции и критерии воздействия химических веществ на окружающую среду	Обзорная лекция	Тематическая дискуссия	Не предусмотрено
Тема 1.2 Общие вопросы токсикологии.	Лекция-диалог	Тематическая дискуссия	Не предусмотрено
Тема 1.3 Токсическое воздействие веществ на экосистемы	Лекция-диалог	Тематическая дискуссия	Не предусмотрено
Тема 1.4 Принципы оценки токсичности веществ	Совмещенная лекция с применением ИТ	Тематическая дискуссия	Не предусмотрено

Тема 1.5 Органические и неорганические токсиканты	Лекция с применением ИТ	Тематическая дискуссия	Не предусмотрено
Раздел II. Реализация экологических задач современными квантово-химическими методами			
Тема 2.1 Программное квантово-химическое обеспечение	Обзорная лекция	Тематическая дискуссия	Не предусмотрено
Тема 2.2 Компьютерная реализация квантово-химических методов	Лекция с применением ресурса STEPIK	Тематическая дискуссия	Не предусмотрено
Раздел III. Корреляционные зависимости между электронной структурой и реакционной способностью рассматриваемого объекта			
Тема 3.1 Химическая реакционная способность молекул	Обзорная лекция	Тематическая дискуссия	Не предусмотрено
Тема 3.2 Квантово-химическое описание реакций	Совмещенная лекция с применением ИТ	Тематическая дискуссия	Не предусмотрено
Раздел IV. Моделирование процессов взаимодействия химических веществ с биологическими системами			
Тема 4.1 Проведение диагностики молекул с использованием квантово-химических методов исследования	Лекция с применением ресурса STEPIK	Тематическая дискуссия	Не предусмотрено
Тема 4.2 Моделирование межмолекулярных взаимодействий	Лекция с применением ИТ	Тематическая дискуссия	Не предусмотрено

Учебные занятия по дисциплине могут также проводиться с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) интерактивном взаимодействии обучающихся и преподавателя в режимах on-line и/или off-line в формах: видеолекций, видеоконференции (с использованием платформы Zoom), собеседования в режиме чат, форума, чата, выполнения виртуальных практических работ и др.

6.2. Информационные технологии

Информационные технологии, используемые при реализации различных видов учебной и внеучебной работы:

- использование возможностей Интернета в учебном процессе (использование информационного сайта преподавателя (рассылка заданий, предоставление выполненных работ, ответы на вопросы, ознакомление учащихся с оценками и т.д.);
- использование электронных учебников и различных сайтов (например, электронные библиотеки, журналы и т.д.) как источников информации;
- использование возможностей электронной почты преподавателя (zoloto.chem@mail.ru или nv.zolotareva@asu-edu.ru);
- использование средств представления учебной информации (электронных учебных пособий и практикумов, применение новых технологий для проведения очных (традиционных) лекций и семинаров с использованием презентаций и т.д.);
- использование интегрированных образовательных сред, где главной составляющей являются не только применяемые технологии, но и содержательная часть, т.е. информационные ресурсы (доступ к мировым информационным ресурсам, на базе которых строится учебный процесс);
- использование виртуальной обучающей среды (LMS Moodle «Электронное образование») или иных информационных систем, сервисов и мессенджеров.

Студенты получают задание для самостоятельного выполнения на каждом семинарском занятии на свой почтовый ящик и должны в течение недели перенаправить

по электронной почте преподавателю ответ. При возможности, преподаватель может через e-mail указать на допущенные ошибки и дать возможность студенту переслать исправленное задание. Таким образом, осуществляется еженедельный контроль за освоением студентами материала дисциплины.

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

6.3.1. Программное обеспечение

Microsoft Office 2013	Пакет офисных программ
Платформа дистанционного обучения LMS Moodle	Виртуальная обучающая среда
Google Chrome	Браузер
Notepad++	Текстовый редактор
Avogadro	Редактор и визуализатор молекул, предназначенный для кроссплатформенного использования в вычислительной химии, молекулярном моделировании, биоинформатике, материаловедении и смежных областях.
MOPAC2016	Вычислительная химия
Scilab	Пакет прикладных математических программ
MathCad 14	Система компьютерной алгебры из класса систем автоматизированного проектирования, ориентированная на подготовку интерактивных документов с вычислениями и визуальным сопровождением
PyCharm EDU	Среда разработки
BKChem	Векторный графический редактор, разработанный на Python и позволяющий вам вручную создавать схематическое представление химических соединений.

6.3.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» <http://dlib.eastview.com>
Имя пользователя: AstrGU
Пароль: AstrGU
2. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <https://library.asu-edu.ru/catalog/>
3. Электронный каталог «Научные журналы АГУ» <https://journal.asu-edu.ru/>
4. 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>

5. Электронная библиотечная система IPRbooks www.iprbookshop.ru
6. Электронно-библиотечная система BOOK.ru <https://book.ru>
7. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги» www.biblio-online.ru, <https://urait.ru/>
8. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех» <https://biblio.asu-edu.ru> Учётная запись образовательного портала АГУ
9. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» www.studentlibrary.ru Регистрация с компьютеров АГУ
10. Единое окно доступа к образовательным ресурсам <http://window.edu.ru>
11. Министерство науки и высшего образования Российской Федерации <https://minobrnauki.gov.ru>
12. Министерство просвещения Российской Федерации <https://edu.gov.ru>

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

7.1. Паспорт фонда оценочных средств

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

Таблица 6 – Соответствие разделов, тем дисциплины, результатов обучения по дисциплине и оценочных средств

Контролируемый раздел, тема дисциплины	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
Раздел 1. Предмет изучения экологических проблем на стыке наук		
Тема 1.1 Концепции и критерии воздействия химических веществ на окружающую среду	ПК-2	Отчет по заданиям к семинару №1 moodle.asu-edu.ru
Тема 1.2 Общие вопросы токсикологии.	ПК-2	Отчет по заданиям к семинару №2 moodle.asu-edu.ru
Тема 1.3 Токсическое воздействие веществ на экосистемы	ПК-2	Отчет по заданиям к семинару №3 moodle.asu-edu.ru
Тема 1.4 Принципы оценки токсичности веществ	ПК-2	Отчет по заданиям к семинару №4 moodle.asu-edu.ru
Тема 1.5 Органические и неорганические токсиканты	ПК-2	Отчет по заданиям к семинару №5 moodle.asu-edu.ru
Раздел 2. Взаимодействие физики и экологии		
Тема 2.1 Программное квантово-химическое обеспечение	ПК-2	Отчет по заданиям к семинару №6 moodle.asu-edu.ru
Тема 2.2 Компьютерная реализация квантово-химических методов	ПК-2	Отчет по заданиям к семинару №7 moodle.asu-edu.ru
Раздел 3. Взаимодействие математики и экологии		

Тема 3.1 Химическая реакционная способность молекул	ПК-2	Отчет по вычислительному практикуму. Отчет по заданиям для самоконтроля в moodle.asu-edu.ru
Тема 3.2 Квантово-химическое описание реакций		Отчет по вычислительному практикуму. Отчет по заданиям для самоконтроля в moodle.asu-edu.ru
Раздел 4. Взаимодействие химии и экологии. Метаболические превращения в объектах окружающей среды		
Тема 4.1 Проведение диагностики молекул с использованием квантово-химических методов исследования	ПК-2	Отчет по лабораторно-вычислительной работе Дискуссия
Тема 4.2 Моделирование межмолекулярных взаимодействий	ПК-2	Отчет по лабораторно-вычислительной работе Дискуссия

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 умение обоснованно излагать свои мысли по обсуждаемым вопросам, способность полно, правильно и аргументированно отвечать на вопросы при отчете вычислительного практикума, приводить примеры
4 «хорошо»	демонстрирует знание материала, его последовательное изложение, способность приводить примеры, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует неполное, фрагментарное знание материала при выполнении вычислительного практикума, требующее наводящих вопросов преподавателя, допускает существенные ошибки в его изложении, затрудняется в приведении примеров и формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	демонстрирует существенные пробелы в знании 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 материала при выполнении заданий вычислительного практикума, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	демонстрирует способность применять знание материала при выполнении заданий вычислительного практикума, 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 вычислительного практикума, выполняет задание по подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	не способен правильно выполнить задания вычислительного практикума

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

РАЗДЕЛ 1. Введение в экологическую химию

Тема 1.1 Концепции и критерии воздействия химических веществ на окружающую среду

1. Темы для подготовки к семинарскому занятию №1

- Экотоксикология, определение и задачи. Современные исследования в области экотоксикологии.
- Характеристика молекулярно-биологического воздействия: мутагенность и канцерогенность.
- Основные критерии возникновения мутагенеза и канцерогенеза под действием химических веществ.
- Современные модели оценки токсичности.

Тема 1.2 Общие вопросы токсикологии

1. Темы для подготовки к семинарскому занятию №2

- Типы клеточных мембран и основные модели (модель элементарной мембраны; жидкостно-мозаичная модель).
- Основные модели переноса веществ через биологические мембраны с помощью переносчиков.
- Ионофоры, структура и механизм функционирования. Современные исследования и поиски новых ионофоров.
- Основные направления воздействия токсикантов на биологические структуры.

Тема 1.3 Токсическое воздействие веществ на экосистемы

1. Темы для подготовки к семинарскому занятию №3

- Действие токсикантов на ферментные системы: блокирование атомов металлов.
- Действие токсикантов на ферментные системы: тиоловых и дитиоловых групп.
- Действие токсикантов на ферментные системы: блокирование синтеза белков.
- Действие на ферментные системы: повреждение желез внутренней секреции.
- Действие токсикантов на ферментные системы: блокирование сульфгидрильных групп.
- Нарушение в системах, регулирующих уровень H_2O_2 в эритроцитах.
- Воздействие фенолов на живые организмы: биохимические основы действия фенолов на структурные элементы живых организмов.

Тема 1.4 Принципы оценки токсичности веществ

1. Темы для подготовки к семинарскому занятию №4

- Критерии и концепции оценки вещества. Экспозиция (доза воздействия веществ).
- Современные электронные ресурсы по токсичности, доступные в сети Internet (<https://chem.nlm.nih.gov/chemidplus/> – поисковая система для установления наличия искомого вещества в одной из многочисленных токсикологических баз данных системы TOXNET; База данных <https://www.ccohs.ca/products/cheminfo/> - содержит информацию по токсичности, экологической опасности химических соединений; <http://www.chemexp.com/> - поисковая система карт химической безопасности. Содержит информацию о более 70 тысячах химических веществ).
- Биологическое воздействие химических продуктов. Оценки опасности и риска.

4. Оценка химических продуктов с помощью экотоксикологического профильного анализа.

Тема 1.5 Органические и неорганические токсиканты

1. Темы для подготовки к семинарскому занятию №5

- а) Поступление в окружающую среду и содержание токсикантов в природных средах. Поведение в окружающей среде и модельных системах.
- б) Токсикологические исследования. Нормы и дозы при различном поступлении в организм. Биологическое действие. Зависимость кожно-раздражающего действия токсикантов и его пороговая концентрация.
- в) Действие органических соединений на органы и системы органов: бромбифенилы, винилхлорид, 1,1-дихлорэтилен, диоксины и родственные им соединения, микотоксины и его производные, изопропаноламины и др.; органические красители; поверхностно-активные вещества и их композиты, синтетические моющие средства; витамины; терпены, различные группы антибиотиков (пенициллин, тетрациклин, блеомицин) и др.
- г) Действие неорганических соединений на органы и системы органов: оксиды серы, азота, сероводород, цианиды, окислители и др.

РАЗДЕЛ 2. Реализация экологических задач современными квантово-химическими методами

Тема 2.1 Программное квантово-химическое обеспечение

1. Темы для подготовки к семинарскому занятию №6

1. Современные комплексы программ для выполнения квантово-химических расчетов. Алгоритмы работы квантово-химических программ.
2. Программы визуализаторы результатов квантово-химических расчетов. Подготовка исходных данных, ключевых команд.

Тема 2.2 Компьютерная реализация квантово-химических методов расчета

1. Темы для подготовки к семинарскому занятию №6

1. Задание исходного строения молекул в системе декартовых и сферических (z-матрица) координат. Спецификация молекулы (мультиплетность, заряд, симметрия и др.). Определение и задание базисного набора. Оптимизация геометрии молекулы неэмпирическими и полуэмпирическими методами.
2. Оценка стабильности молекулы. Оценка растворимости молекул. Определение нуклеофильных и электрофильных свойств молекулы. Определение жесткости и мягкости молекулы. Определение положения реакционных центров.
3. Неэмпирические методы расчета: базисные функции атомных орбиталей (базисные наборы).
4. Методы теории функционала плотности.
5. Полуэмпирические методы расчета: принципы параметризации.
6. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля для оценки реакционной способности органических соединений. Индексы реакционной способности. Примеры реализации.

РАЗДЕЛ 3. Корреляционные зависимости между электронной структурой и реакционной способностью рассматриваемого объекта

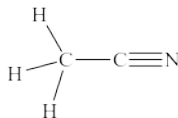
Тема 3.1 Химическая реакционная способность молекул

1. Перечень дискуссионных тем для проведения круглого стола

1. Вычисление индексов реакционной способности молекул методом Хюккеля и методом Лонге-Хиггинса. Статический метод Коулсона и Лонге-Хиггинса.
2. Статический метод граничных молекулярных орбиталей Фукуи.
3. Динамический метод. Приближение Уэланда для переходного состояния реакции.

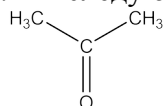
2. Типовые задания для самоподготовки

1. Вычислите картезианские координаты молекулы метилциана, результаты оформите в таблицу, и спроецируйте 3D модель молекулы:



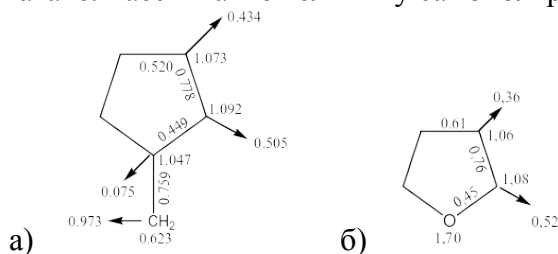
Справка для запоминания: Легковоспламеняющаяся жидкость со слабым эфирным запахом, при воспламенении выделяет токсичные пары цианида водорода и оксиды азота. Токсичность обусловлена способностью образовывать соединения с ионами тяжелых металлов, которые блокируют необходимые для клеточного дыхания ферменты, это приводит к асфиксии. При воздействии кожа и дыхательная система должны быть защищены в первую очередь. ПДК загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест регламентируются гигиеническим нормативом ГН 2.1.6.1338-03 и ПДК вредных веществ в воздухе рабочей зоны регламентируются гигиеническим нормативом ГН 2.2.5.686-98.

2. Постройте молекулярную диаграмму и установите, какие реакционные центры в молекуле отвечают за протекание реакций при нуклеофильной, электрофильной и свободнорадикальной атаке на основании следующих дескрипторов:

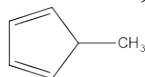


-электронная плотность молекулы;
 -порядок π -электронного связывания;
 -индекс свободной валентности;
 -распределение зарядов на атомах;
 -самополяризуемость атомов.

3. Выясните реакционную активность атомов в молекулах фульвена (а) и фурана (б), исходя из статического метода Лонге – Хиггинса, при радикальной и электрофильной атаке. Рассчитайте величину самополяризуемости исследуемых молекул.



4. Сформулируйте основные принципы теории локализации Уэланда. Приведите примеры.
5. Выясните, сколько электронов располагается в переходном состоянии фульвена при электрофильном и радикальном замещении.



6. Распишите молекулярную диаграмму бутадиена методом МО Хюккеля, указав порядок связи, индекс свободной валентности молекулы, заряды центрального остова и дайте полную характеристику волновых функций молекулярных орбиталей, а также значения энергии МО бутадиена.

Тема 3.2 Квантово-химическое описание реакций

1. Темы для подготовки презентаций

- а) Поверхность потенциальной энергии химической реакции. Теория переходного состояния. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции.

б) Особые точки равновесных и переходных состояний. Путь химической реакции, координата реакции. Квантово-химическое описание химических реакций в жидкой и твердой фазе.

в) Молекулярный электростатический потенциал. Абсолютная жесткость и абсолютная мягкость молекулярных систем. Энергия диссоциации химической связи в молекулярной системе.

г) Орбитальные модели взаимодействия молекул с поверхностью. Хемосорбция. Квантовая химия каталитических реакций.

2. Темы для постановки вычислительного эксперимента

1. Расчет энергии активации элементарной химической реакции.
2. Расчет константы равновесия, скорости реакции и константы скорости реакции.

РАЗДЕЛ 4. Моделирование процессов взаимодействия химических веществ с биологическими системами

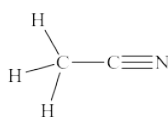
Тема 4.1 Проведение диагностики макромолекулярных систем с использованием квантово-химических методов исследования

1. Задания вычислительного эксперимента

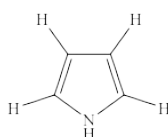
Составление молекулярных диаграмм для несложных молекул и предсказания их реакционной способности с применением метода молекулярных орбиталей Хюккеля и с помощью полуэмпирических и неэмпирических методов. Нахождение порядков связей, индексов свободной валентности, распределения зарядов и других структурных и энергетических параметров.

Варианты

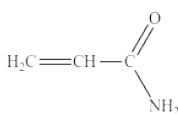
метилциан



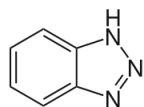
пиррол



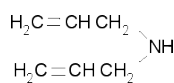
акриламида



бензотриазол

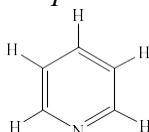


диаллиламин

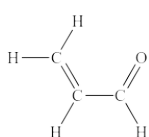


2,4-динитротолуол

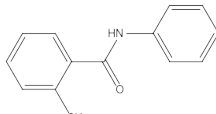
пиридин



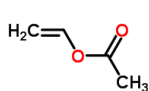
акролеин



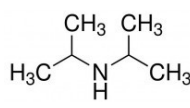
салициланилид



винилацетат

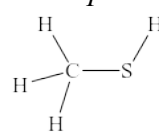


*диизопропиламин

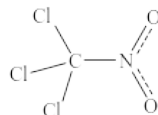


*1,4-дигидроксиантрахинон

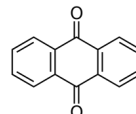
метилмеркаптан



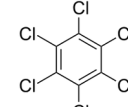
хлорпикрин



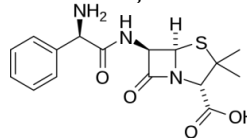
антрахинон



гексахлорбензол

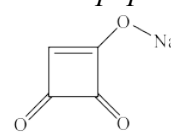


*ампициллин

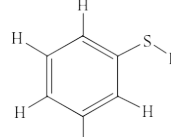


дифтордихлорметан

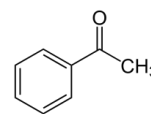
монилиформин



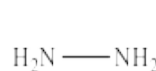
фенилмеркаптан



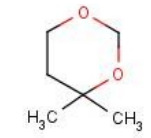
ацетофенон



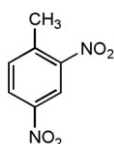
гидразин



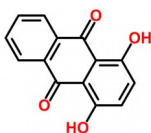
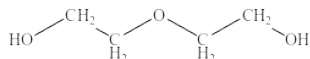
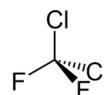
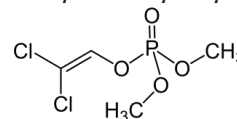
*диметилдиоксан



*2,3-Дихлор-1,4-нафтохинон



*Диэтиленгликоль

*2,3,7,8 –
тетрахлордифеннофуран*O,O-диметил-O-2,2-
дихлорвинилфосфат

Примерный план отчета

1. Цель и задачи исследования.
2. Способы реализации, методы исследования.
3. Составление молекулярной диаграммы, графические иллюстрации.
4. Основные положения и математический аппарат.
5. Анализ теоретически полученных данных, описание реакционной способности молекулы.
6. Анализ сведений о биологической активности соединения, токсичности и класса опасности, наличие антидотов, блокаторов.
7. Обобщенные выводы.

Типовой макет отчета задания вычислительного практикума

1. Визуализация молекул осуществляется с использованием программ, имеющих бесплатное распространение в академических целях: MaSK (<http://ccmsi.us/mask/>); Avogadro (<https://avogadro.cc/>); Jmol (<http://jmol.sourceforge.net/>); RasMol (<http://www.openrasmol.org/>).
2. Сохранение оптимизированной молекулы в декартовых и во внутренних координатах по образцам:

Пространственное описание в декартовых координатах					
Тип	номер атома	Порядковый номер	x	y	z

Пространственное описание во внутренних координатах (z-матрица)						
Тип атома	№ атома	r, Å (нм)	№ атома	θ, °	№ атома	φ, °

3. Составление входного файла (.mor; .inp) для вычисления. Выполнить расчет, указанным методом. Для выполнения расчетов могут быть использованы следующие программы бесплатного распространения в академических целях: MOPAC (<http://openmopac.net/>); GAMESS (<https://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/download/register/>). Примеры файлов, описание ключевых команд и, реализуемые методы вычисления программы GAMESS находятся в разделе (<https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/documentation.html>), MOPAC (<http://openmopac.net/Manual/index.html>). Постановка задачи на расчет.
4. Обработка выходного файла (.out). Заполнить таблицу по образцу (заполнение ячеек согласно требованиям вычислительного практикума):

Структурные параметры молекулы				
длины связей, r, Å	валентные углы, θ, °	торсионные углы, φ, °	заряд на атомах, q, а.е.з.	дипольный момент молекулы, μ, Дебай
				...
реакционного центра молекулы				среднеквадратичный градиент (RMS Gradient)

Энергетические параметры молекулы											
площадь молекулы, $S_{\text{cosmo}}, \text{\AA}^2$			энергии граничных МО, $E_{\text{MO}}, \text{эВ}$						количество связывающих МО		
			ВЗМО (НОМО)			НСМО (LUMO)			...		
...			...						величина энергетической щели, эВ		
				
объем молекулы, $V_{\text{cosmo}}, \text{\AA}^3$			потенциал ионизации, $I, \text{эВ}$			общая энергия, $E_{\text{tot}}, \text{кДж/моль}$			теплота образования, $H_f, \text{кДж/моль}$		
...				
частоты колебаний функциональных групп, см^{-1}											
квантово-механические вычисления						экспериментальные (справочные)					
валентные - ν_s, ν_{as}			деформационные - δ			валентные - ν_s, ν_{as}			деформационные - δ		
...				
Термодинамические параметры молекулы											
энтальпия, $H, \text{кДж/моль}$			энтропия, $S, \text{Дж/(моль}\cdot\text{К)}$			изобарно-изотермический потенциал, $G, \text{кДж/моль}$			теплоемкость, $C_p/C_v, \text{Дж/(моль}\cdot\text{К)}$		
273К	298К	318К	273К	298К	318К	273К	298К	318К	273К	298К	318К
...

5. Построение графика зависимости «Среднеквадратичного градиента (или Общей энергии) от количества шагов оптимизации (n)» для равновесной структуры молекулы.
6. Сопоставить результаты расчетов с экспериментальными (справочными) данными. Указать наилучшую сходимость полученных данных с результатами эксперимента.
7. Сделать вывод о структуре и реакционной способности молекул. Установить активные центры в структурах.

Общие требования к выполнению и отчету

Работа считается выполненной, если построены молекулярные диаграммы молекул, приведены необходимые расчеты геометрических и энергетических параметров, проанализированы свойства, сделаны соответствующие выводы реакционной способности изучаемого соединения и представлены сведения о биологической активности, токсичности вещества, данные о существующих антидотах или блокаторах.

Тема 4.2 Моделирование межмолекулярных взаимодействий

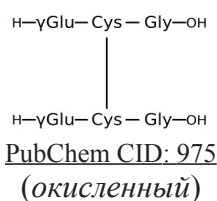
1. Задания вычислительного эксперимента

Моделирование контактных взаимодействий между токсикантами и модельными структурными фрагментами – три-, тетра-, пента-, гекса-, гептапепид, фосфолипиды. Анализ энергетических и структурных параметров моделируемых систем. Поиск наиболее активной функциональной группы в структуре модельного компонента.

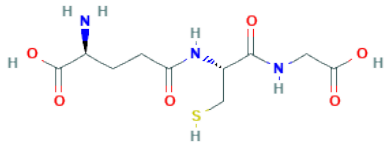
Варианты трипептиды

Глутатион

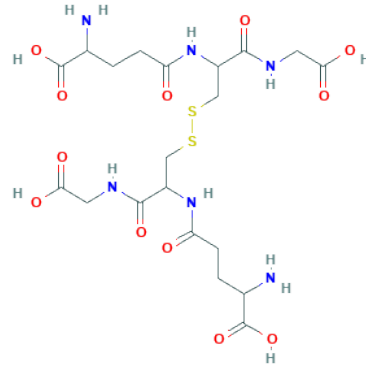
H-gGlu-Cys-Gly-OH
PubChem CID: 124886
 (восстановленный)



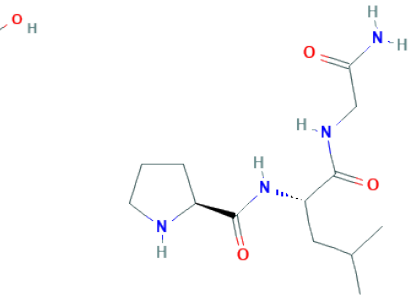
Меланостатин
 H-Pro-Leu-Gly-NH₂
PubChem CID: 92910



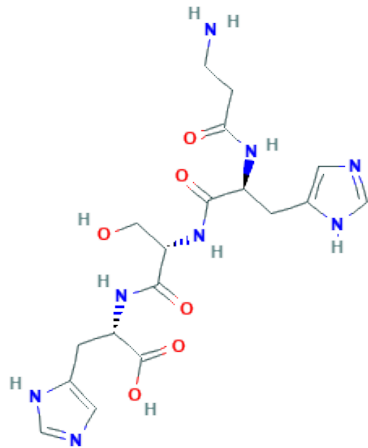
H-βAla-His-Ser-His-OH
PubChem CID: 71587844



тетрапептиды

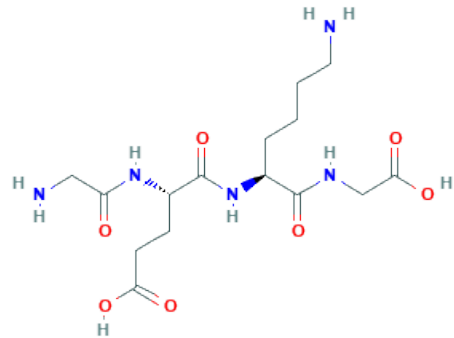


H-Gly-Glu-Lys-Gly-OH
PubChem CID: 42630677

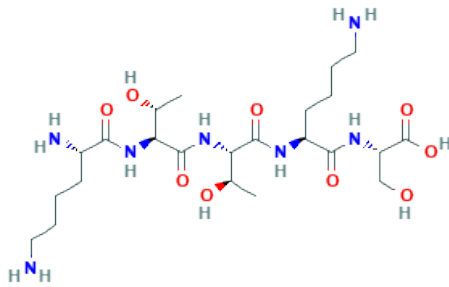


H-Lys-Thr-Thr-Lys-Ser-OH
PubChem CID: 9959565

пентапептиды

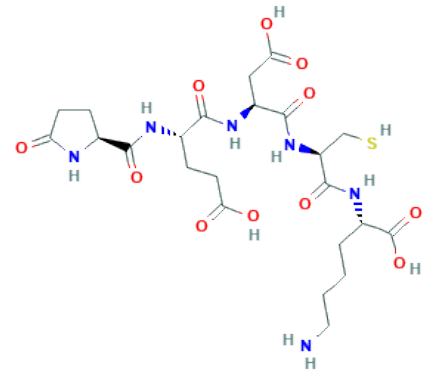


H-Pyr-Glu-Asp-Cys-Lys-OH
PubChem CID: 123651

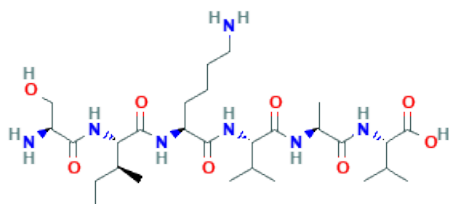


H-Ser-Ile-Lys-Val-Ala-Val-OH
PubChem CID: 10145673

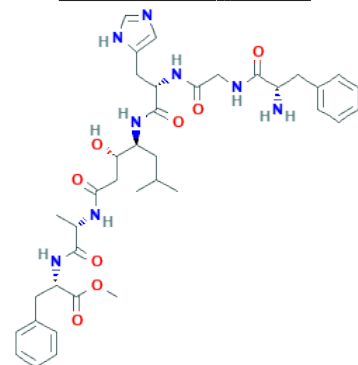
гексапептиды



H-Phe-Gly-His-Sta-Ala-Phe-OMe
PubChem CID: 194954

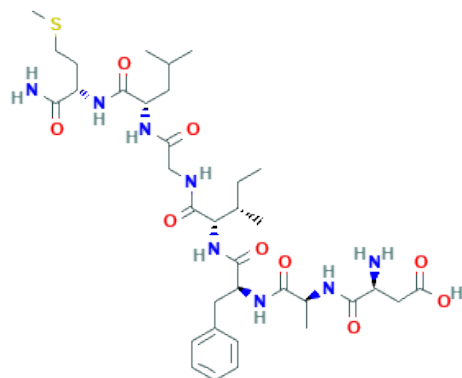


гептапептид

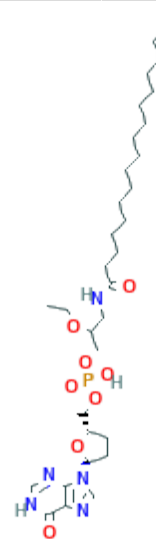


фосфолипиды

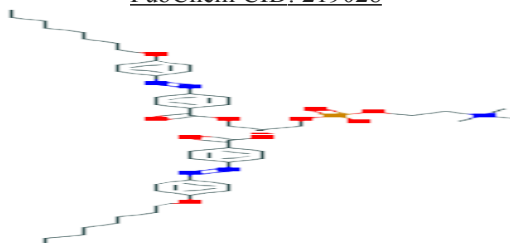
H-Asp-Ala-Phe-Ile-Gly-Leu-Met-NH₂
 PubChem CID: 5748244



C₃₃H₅₈N₅O₈P
 PubChem CID: 135538722



фосфолипиды
 C₅₀H₆₈N₅O₁₀P
 PubChem CID: 219028



Примерный план отчета

1. Цель и задачи исследования.
2. Способы реализации, методы исследования.
3. Составление молекулярной диаграммы, систем межмолекулярных взаимодействий, графические иллюстрации.
4. Анализ вычисленных данных и установление активных функциональных групп в модельном фрагменте.
5. Обзор сведений о модельном фрагменте (место локализации, основные функции).
6. Обобщенные выводы: о функциональной активности выбранной модели фрагмента клеточной мембраны, о наличии или отсутствии потенциальных мишеней на поверхности модельной системы, о подборе потенциального антидота к токсичной молекуле.

Типовой макет отчета задания

1. Визуализация модельного фрагмента (*n*-пептид, фосфолипид) осуществляется с использованием программ, имеющих бесплатное распространение в академических целях: MaSK (<http://ccmsi.us/mask/>); Avogadro (<https://avogadro.cc/>); Jmol (<http://jmol.sourceforge.net/>); RasMol (<http://www.openrasmol.org/>).
2. Сохранение оптимизированного модельного фрагмента (*n*-пептид, фосфолипид) в декартовых и во внутренних координатах по образцам:

<i>Пространственное описание в декартовых координатах</i>				
<i>Тип номер атома</i>	<i>Порядковый номер</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
...

<i>Пространственное описание во внутренних координатах (z-матрица)</i>						
<i>Тип атома</i>	<i>№ атома</i>	<i>r, Å (нм)</i>	<i>№ атома</i>	<i>θ, °</i>	<i>№ атома</i>	<i>φ, °</i>
...

3. Составление входного файла (.mor; .inp) для вычисления. Выполнить расчет, указанным методом. Для выполнения расчетов могут быть использованы следующие программы бесплатного распространения в академических целях: MOPAC (<http://openmopac.net/>); GAMESS (<https://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/download/register/>). Примеры файлов, описание ключевых команд и, реализуемые методы вычисления программы GAMESS находятся в разделе (<https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/documentation.html>), MOPAC (<http://openmopac.net/Manual/index.html>). Постановка задачи на расчет.
4. Обработка выходного файла (.out). Модельная система иллюстрирует контактное взаимодействие между молекулой токсиканта и модельным фрагментом (*n*-пептид, фосфолипид) клеточной мембраны. Заполнить таблицу по образцу:

<i>Структурные и энергетические параметры модельной системы</i>									
длины связей, <i>r, Å</i>		валентные углы, $\theta, ^\circ$		торсионные углы, $\phi, ^\circ$		заряд на атомах, <i>q, а.е.з.</i>		среднеквадратичный градиент (RMS Gradient)	
...		
реакционного центра в модельной системе								количество связывающих МО	
...		
площадь системы, $S_{\text{cosmo}}, \text{Å}^2$		энергии граничных МО, $E_{\text{MO}}, \text{эВ}$				величина энергетической щели, эВ			
...		ВЗМО (НОМО)		НСМО (LUMO)		...			
...			теплота образования, $H_f, \text{кДж/моль}$			
объем системы, $V_{\text{cosmo}}, \text{Å}^3$		потенциал ионизации, $I, \text{эВ}$...			
...		...				общая энергия, $E_{\text{tot}}, \text{кДж/моль}$			
...				
<i>Частоты колебания функциональных групп в реакционном центре, см^{-1}</i>									
квантово-механические вычисления					экспериментальные (справочные)				
валентные - ν_s, ν_{as}		деформационные - δ			валентные - ν_s, ν_{as}		деформационные - δ		
...			
<i>Термодинамические параметры модельной системы</i>									
изменение энтальпии, $\Delta H, \text{кДж/моль}$			изменение энтропии, $\Delta S, \text{Дж/(моль}\cdot\text{К)}$			изменение изобарно-изотермического потенциала, $\Delta G, \text{кДж/моль}$			
273К	298К	318К	273К	298К	318К	273К	298К	318К	
...

5. Построение графика зависимости «Среднеквадратичного градиента (или Общей энергии) от количества шагов оптимизации (*n*)» для равновесной модельной системы.
6. Анализ термодинамики процесса взаимодействия в модельной системе. Выводы о потенциальных мишенях в модельном фрагменте и энергетике процессов.

7. Построение корреляционных зависимостей в модельных системах «Структура – Свойство», «Структура – Активность».

Общие требования к выполнению и отчету индивидуальной работы

Работа считается выполненной, если составлены системы межмолекулярных взаимодействий, заполнена таблица структурных, энергетических и термодинамических параметров, сделаны выводы об активности потенциальных мишеней в модельном фрагменте, построены корреляционные зависимости «Структура – Свойство», «Структура – Активность» и сделаны соответствующие выводы.

**Типовой перечень вопросов и заданий,
выносимых на экзамен / зачёт / дифференцированный зачёт**

1. Экотоксикология, определение и задачи. Молекулярно-биологическое воздействие.
2. Мутагенность и канцерогенность. Основные критерии возникновения мутагенеза (канцерогенеза) под действием химических веществ.
3. Модели оценки токсических воздействий.
4. Клеточные мембраны. Транспорт веществ.
5. Модель элементарной мембраны. Жидкостно-мозаичная модель. Сравнительный анализ.
6. Энергетика пассивного и активного транспорта. Перенос веществ через биологические мембраны с помощью переносчиков.
7. Основные структурные особенности ионофоров. Катионная селективность ионофоров.
8. Динамика комплексообразования с ионофорами. Антибиотики-каналообразователи.
9. Основы действия токсикантов на биологические структуры.
10. Взвешенные в воздухе токсичные частицы.
11. Химическое загрязнение природных вод.
12. Неорганические и органические загрязнители.
13. Сброс отходов в море с целью захоронения (дампинг).
14. Кислые атмосферные загрязнители.
15. Связь между строением веществ и их токсичностью.
16. Действие токсикантов на ферментные системы.
17. Прямое воздействие токсикантов на ферменты. Блокирование атомов металлов и цитохромов.
18. Блокирование тиоловых и дитиоловых групп. Воздействие по типу «летального синтеза».
19. Блокирование синтеза белка. Повреждение желез внутренней секреции.
20. Блокирование сульфгидрильных групп. Ферментативные нарушения в эритроцитах.
21. Нарушение систем, регулирующих уровень пероксида водорода в эритроцитах.
22. Механизмы метгемоглобинообразования.
23. Воздействие фенолов на живые организмы.
24. Критерии и концепции оценки вещества. Экспозиция (доза воздействия веществ).
25. Биологическое воздействие химических продуктов.
26. Оценка химических продуктов с помощью экотоксикологического профильного анализа.
27. Поступление в окружающую среду и содержание токсикантов в природных средах.
28. Поведение в окружающей среде и модельных системах. Токсикологические исследования.
29. Нормы и дозы при различном поступлении в организм.
30. Зависимость кожно-раздражающего действия токсикантов и его пороговая концентрация.
31. Полуэмпирические методы расчета. Основные требования к полуэмпирическим методам.

32. Принципы параметризации полуэмпирических методов.
33. Расширенный метод Хюккеля. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля.
34. Статический метод Коулсона и Лонге-Хиггинса.
35. Метод граничных молекулярных орбиталей Фукуи.
36. Динамический метод. Приближение Уэланда для переходного состояния реакции.
37. Метод оценки энергии локализации Лонге-Хиггинса и Дьюара.
38. Индексы реакционной способности. Правило Вудворда-Хоффмана и его применение для оценки реакционной способности органических соединений.

Таблица 9 – Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности				
1.	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Волновая функция – это...</p> <p>а) величина, полностью описывающая состояние микрообъекта и любой квантовой системы;</p> <p>б) вероятность нахождения частицы в определенный момент времени t в точке пространства с координатами x, y, z;</p> <p>в) величина, полностью описывающая состояние макрообъекта;</p> <p>г) функция волны.</p>	а	1
2.		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Волновая функция обязана удовлетворять ряду требований (несколько вариантов):</p> <p>а) однозначности и конечности во всем пространстве переменных;</p> <p>б) непрерывности, однозначности и конечности во всем пространстве переменных;</p> <p>в) должна быть, как минимум дважды дифференцируема и однозначна;</p> <p>г) нормированности, непрерывности, однозначности и конечности во всем пространстве переменных.</p>	в, г	1
3.		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Установите определитель для молекулы изобутена C_4H_8:</p>	а	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		а) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 1 & 0 & y \end{vmatrix}$ б) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}$ в) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 1 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 1 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}$ г) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 0 & 1 & 1 & y \end{vmatrix}$		
4.		Собственные волновые функции φ_n и φ_m являются <u>ортонормированными</u> , если выполняется условие: а) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = \delta_{mn}$ б) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = 0$ в) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = 1$ г) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau \neq 0$	а	1
5.		Метод молекулярных орбиталей Хюккеля основан на ряде приближений: а) σ -электронным б) пренебрежение интегралами межэлектронного отталкивания в) π -электронным	б	1
6.	Задание открытого типа	Запишите развернутый ответ: Основные отличия мутагенности от канцерогенности?	Мутагенность - способность к мутационным наследственным изменениям. это свойства некоторых химических, физических и биологических факторов самостоятельно или в комплексе с др. факторами вызывать или содействовать развитию	5

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			<p>злокачественных новообразований. Подобные факторы называются канцерогенными, а процесс возникновения опухолей в результате их воздействия – канцерогенезом.</p>	
7.		<p>Запишите развернутый ответ:</p> <p>Составьте систему линейных уравнений для молекулы $\text{CO}(\text{CH}_3)_2$ и опишите, какие параметры включены в описание простого метода Хюккеля</p>	<p>Система МО ЛКАО для молекулы будет иметь следующий вид: $C_1x + C_2 * K + C_3 = 0$ $C_1K + C_2(x+K) + C_3 + C_4 = 0$ $C_2 + C_3x = 0$ $C_2 + C_4x = 0$</p> <p>В стандартную схему Хюккеля включены следующие параметры: Электронная плотность; заряд, порядковый номер и индекс свободной валентности.</p>	5
8.		<p>Запишите развернутый ответ:</p> <p>Решить задачу и описать этапы вычисления: Вычислите декартовы координаты хлорноватистой кислоты HOCl. Известны радиусы по Полингу (Å) для H = 0,3; O = 0,66, Cl = 0,99.</p>	<p>Пронумеруем атомы и центрируем на координатной сетке. Поскольку молекула укладывается в плоскости xy, то целесообразно упростить вычислительную модель. Таким образом, связь $\text{O}^1\text{-Cl}^2$ будет вытянута вдоль оси x, а H будет направлен в третью четверть под углом 104 градуса. Что приблизительно соответствует валентному углу в молекуле воды. Для O^1 координаты соответствуют (0;0;0). Для Cl^2: $x = (R(\text{O}) + R(\text{Cl})) \cdot \cos(0) = (0,66 + 0,99) \cdot 1 = 1,65$ $y = (R(\text{O}) + R(\text{Cl})) \cdot \sin(0) = (0,66 + 0,99) \cdot 0 = 0$ $z = 0$. Для H^3: $x = (R(\text{H}) + R(\text{O})) \cdot \cos(180 - 104) = (0,3 + 0,66) \cdot 0,24 = 0,23$ $y = (R(\text{H}) + R(\text{O})) \cdot \sin(76) = (0,3 + 0,66) \cdot 0,97 = 0,93$</p>	5-8

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			$z=0$. Следовательно, атомы в молекуле хлорноватистой кислоты имеют следующие декартовы координаты: $O^1 (0;0;0)$ $Cl^2 (1,65;0;0)$ $H^3 (0,23;0,93;0)$	
9.		Запишите развернутый ответ: Решить задачу и определить вычислительную модель: Электрон заключен в полиионовой молекуле длиной 20 нм. Рассчитайте энергию основного состояния?	Движение электрона в полиионовой молекуле можно представить в рамках модели движения частицы в прямоугольном ящике с бесконечно высокими стенками. Тогда, энергию электрона в основном состоянии можно вычислить по формуле: $E_1 = (\pi^2 \cdot n^2 \cdot (h/2\pi)^2) / (2 \cdot m_e \cdot a^2)$. Таким образом, $E_1 = ((3,14)^2 \cdot 1^2 \cdot (1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Дж/с}) / ((2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг}) \cdot (20 \cdot 10^{-9} \text{ м})^2)) = 1,503 \cdot 10^{-22} \text{ Дж}$	5-8
10.		Запишите развернутый ответ: Ниже представлен график функции радиального распределения электронной плотности для основного состояния атома водорода. О чем свидетельствует максимум на кривой и значение $1,41 \text{ \AA}$? <div data-bbox="542 1456 861 1747" style="text-align: center;"> </div>	Функция $\sigma(r)$ имеет максимум при $r = 0,53 \text{ \AA}$, что свидетельствует максимальной вероятности нахождения электрона на расстоянии отличным от нуля. Данное расстояние совпадает с радиусом первой орбиты по теории Бора. Однозначно точно указать объем пространства, в котором вероятность нахождения электрона будет равна 1 (100%), невозможно, как невозможно и указать, в какой точке пространства находится электрон в данный момент. Поэтому указывается объем пространства, в пределах которого вероятность нахождения электрона составляет величину 0,9 (90%). Такая область пространства называется орбиталью электрона, в	5-8

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			отличие от орбиты в классической теории. Для основного состояния атома водорода радиус орбитали составляет $1,41 \text{ \AA}$.	
11.	Задания комбинированного типа	<p>Запишите развернутый ответ:</p> <p>Квантовая механика — это раздел _____, который описывает поведение _____ объектов, таких как атомы, молекулы и элементарные частицы, на квантовом уровне.</p> <p>В чем заключается сходство и различие таких дисциплин как квантовая биофизика и квантовая экологическая химия?</p>	<p>физики микроскопических</p> <p>Квантовая биофизика и квантовая экологическая химия — это специализированные области, которые исследуют взаимодействия квантовых эффектов с биологическими и экологическими системами соответственно.</p> <p>Квантовая биофизика содержит основные области знаний - квантовые эффекты в фотосинтезе - исследование механизмов захвата и передачи энергии в органических молекулах, участвующих в фотосинтетических процессах. Основным интерес представляют квантовые эффекты - когерентность способствует эффективной передаче энергии.</p> <p>Квантовая биология и сигнализация- анализ того, как квантовые механизмы могут влиять на процессы, такие как перенос электронной энергии и обмен информации в клетках.</p> <p>Суперпозиции и когерентности в биомолекулах - изучение особенностей поведения молекул в рамках квантовых состояний, что может способствовать пониманию процессов,</p>	5-8

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			<p>таких как спонтанная мутация и биологическая эволюция.</p> <p>А также, квантовая медицина: на уровне разработки методов диагностики и лечения на основе квантовых технологий.</p> <p>Квантовая экологическая химия включает следующие разделы:</p> <p>Изучение квантовых процессов в газах и аэрозолях - на стадии моделирования взаимодействий между атмосферными газами (поллютантами), частицами и солнечным излучением, изучаются механизмы воздействия на климатические изменения и качество воздуха.</p> <p>Квантовая химия в фотохимии - направлены на изучение фотохимических реакций, таких как фотолиз загрязняющих веществ, и их влияние на экосистемы.</p> <p>Моделирование реакций в водных экосистемах - это еще одна область знаний, исследование химических реакций в водной среде, включая реакции между загрязняющими веществами и биомолекулами.</p> <p>Квантовая химия также решает задачи для понимания токсикологии - изучение взаимодействия загрязняющих веществ с биологическими системами на молекулярном уровне для оценки их токсичности.</p> <p>Экологическая оценка и прогнозирование - применение квантовых</p>	

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			моделей для прогнозирования поведения химических веществ в окружающей среде, включая их распределение, концентрацию и переработку.	

7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Методические материалы составляют систему текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины, закрепляют виды и формы текущего контроля, сроки проведения, а также виды промежуточной аттестации по дисциплине, ее сроки и формы проведения. В системе контроля указывается процедура оценивания результатов обучения по данной дисциплине при использовании бально-рейтинговой системы, показывается механизм получения оценки, основные положения БАРС, указывается система бонусов и штрафов, примерный набор дополнительных показателей.

Преподаватель, реализующий дисциплину, в зависимости от уровня подготовленности обучающихся может использовать иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

Таблица 10 – Технологическая карта рейтинговых баллов по дисциплине

№	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий/баллы	Максимальное кол-во баллов	Срок представления
Основной блок				
1	Семинарские занятия	7/2	14	По расписанию
2	Выполнение вычислительного практикума. Отчет по работе	4/4	16	По расписанию
3	Задачи для самоконтроля	2/5	10	По расписанию
Промежуточный контроль			40	
4	Экзамен	50 баллов	50	По расписанию
ИТОГО			100	ЭКЗАМЕН

Таблица 11 - Система штрафов (для одного занятия)

Показатели	Балл
Опоздание (более двух раз)	-2
Не готов(а) к практической части лабораторных занятий	-3
Нарушение учебной дисциплины	-2
Пропуск лекций без уважительной причины (за одно занятие)	-3
Пропуск лабораторного занятия без уважительной причины (за одно занятие)	-3
Нарушение правил техники безопасности	-2

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

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

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

8.1. Основная литература

1. Исидоров В.А. Экологическая химия: учеб. пособ. для вузов ... спец. "Охрана окружающей среды и рациональное использование природных ресурсов". - СПб.: Химиздат, 2001. - 304 с.
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособ. для студентов вузов ... по химическим специальностям. - М.: Академия, 2008. - 384 с.
3. Ложниченко О.В. Экологическая химия: учебное пособие для вузов / О.В. Ложниченко, И.В. Волкова, В.Ф. Зайцев – М.: Академия, 2008. 272 с.
4. Холанд А. Молекулы и модели. Молекулярная структура соединений элементов главных групп / перевод. Г. Гиричев, Н. Гиричева – Красанд, УРСС, 2011. 384 с.
5. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. – М.: СОЛОН-Пресс, 2005. – 536с.
6. Гельман Г. Квантовая химия/предисл. и коммент. А.Л. Чугреева; Доп. Г. Гельмана мл. - 2-е изд.; доп. - М.: БИНОМ. Лаб. знаний, 2011. - 533 с.
7. Плетенёва Т.В., Токсикологическая химия [Электронный ресурс] / "Плетенева Т.В., Сыроешкин А.В., Максимова Т.В.; Под ред. Т.В. Плетенёвой" – М.: ГЭОТАР-Медиа, 2013.-512с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970426357.html>

8.2. Дополнительная литература

1. Фелленберг Г. Загрязнение природной среды. Введение в экологическую химию / пер. с нем. А.В. Очкина; Под ред. К.Б. Заборенко. - М. : Мир, 1997. - 232 с.
2. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон - М. : Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. (Учебник для высшей школы) - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015024.html>
3. Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / И.Г. Каплан - М.: Лаборатория знаний, 2017. - 397 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015031.html>
4. Калетина Н.И. Токсикологическая химия. Метаболизм и анализ токсикантов / Под ред. проф. Н.И. Калетиной - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2008. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970406137.html>
5. Калетина Н.И. Токсикологическая химия. Ситуационные задачи и упражнения / Н. И. Калетина - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2007. - 352 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970405406.html>
6. С.А. Еремин и др. Токсикологическая химия. Аналитическая токсикология: учебник / Еремин С.А., Калетин Г.И., Калетина Н.И. и др. Под ред. Р.У. Хабриева, Н.И. Калетиной - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2010. - 752 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970415375.html>
7. Колок А. Современные яды: Дозы, действие, последствия / Колок А. - М. : Альпина Паблишер, 2017. - 215 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785961458688.html>

8.3. Интернет-ресурсы, необходимые для освоения дисциплины

1. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» <http://dlib.eastview.com>
Имя пользователя: AstrGU
Пароль: AstrGU
2. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <https://library.asu-edu.ru/catalog/>
3. Электронный каталог «Научные журналы АГУ» <https://journal.asu-edu.ru/>
4. 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>
5. Электронная библиотечная система IPRbooks www.iprbookshop.ru
6. Электронно-библиотечная система BOOK.ru <https://book.ru>
7. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги» www.biblio-online.ru, <https://urait.ru/>
8. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех» <https://biblio.asu-edu.ru> Учётная запись образовательного портала АГУ
9. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» www.studentlibrary.ru Регистрация с компьютеров АГУ

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины включает в себя аудиторию для проведения вычислительно-практических занятий, компьютерный (дисплейный) класс. В учебном процессе для освоения дисциплины используются компьютерные, мультимедийные оборудования. Программа включает в себя материалы вычислительного практикума на ПК для самостоятельной работы студентов.

При необходимости рабочая программа дисциплины может быть адаптирована для обеспечения образовательного процесса инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, в том числе для обучения с применением дистанционных образовательных технологий. Для этого требуется заявление студента (его законного представителя) и заключение психолого-медико-педагогической комиссии (ПМПК).