

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

_____ Носачев С.Б.

«04» апреля 2024 г.

УТВЕРЖДЕНО
Заведующий кафедрой ХМ

_____ Джигола Л.А.

«04» апреля 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Квантовая экологическая химия»

Составитель

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

Согласовано с работодателями:

**Фидурова С.Н., заместитель начальника отдела
физико-химических исследований инженерно-
технического центра ООО «Газпром добыча
Астрахань»**

**Лукин Н.В., директор МБОУ г. Астрахани
«Лицей №2»**

Направление подготовки /
специальность

**04.05.01 ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И
ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ**

Направленность (профиль) ОПОП

Квалификация (степень)

Химик. Преподаватель химии

Форма обучения

очная

Год приема

2024

Курс

2

Семестр

4

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 студентов с ключевыми понятиями и постулатами в квантовой механике, существующими методами решения базового стационарного уравнения Шредингера для 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” относится к обязательной части дисциплин (Б.1.В.04), формируемой участниками образовательных отношений и осваивается в 5 семестре. Дисциплина встраивается в структуру ОПОП как с точки зрения преемственности содержания, так и с точки зрения непрерывности процесса формирования компетенций выпускника. «Входные» знания, умения и опыт обучающегося, необходимые для при освоении дисциплины «Квантовая экологическая химия», приобретенные в результате освоения предшествующих дисциплин связаны со знанием теоретических основ высшей математики, физики и информатики.

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

- «Высшая 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:

-Квантовая механика и квантовая химия;

-Строение вещества;

-Кристаллохимия;

-Органическая химия;

-Физическая химия.

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

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 компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)		
		Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
ПК-2	ПК-2.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана работы	Использует базовые знания в квантовой теории при описании поведения атомов в молекуле и прогнозе реакционной способности	использовать терминологию и основные понятия направлений	Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений
	ПК-2.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач	методы, алгоритмы постановки вычислительного эксперимента, а также способы обработки результатов.	анализировать результаты экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.	способами систематизации и анализа результатов наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.
	ПК-2.3 Проводит отбор, идентификацию образцов, подготовку технической документации на образцы, устанавливает нормативные значения контролируемых показателей	Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности; основы квантовой теории для решения экологических задач, связанных с моделированием процессов и изучением свойств веществ, а также, возможности	Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик; использовать математический аппарат, алгоритмы расчетов квантовой механики для моделирования	Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений; приемами квантовой механики, методами, алгоритмами математического анализа при моделировании

Код компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)		
		Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
		квантово-химических программных комплексов для решения естественнонаучных задач в разделах органической, биорганической и физической химии.	процессов и изучения свойств веществ, а также, использовать квантово-химические программы, алгоритмы расчетов для построения модельных схем в разделах органической, биорганической и физической химии и интерпретировать полученные результаты расчетов.	схем межмолекулярных взаимодействий и интерпретации результатов расчета, а также, алгоритмами, схемами выполнения стандартных процедур при построении модельных схем с использованием компьютерных квантово-химических программ.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины в соответствии с учебным планом составляет 4 зачетных единицы (144 часа), семестр – 4.

Трудоемкость отдельных видов учебной работы студентов очной формы обучения приведена в таблице 2.1.

Таблица 2.1. Трудоемкость отдельных видов учебной работы по очной форме обучения

Вид учебной и внеучебной работы	для очной формы обучения
Объем дисциплины в зачетных единицах	4
Объем дисциплины в академических часах	144
Контактная работа обучающихся с преподавателем (всего), в том числе (час.):	36
- занятия лекционного типа, в том числе:	36
- практическая подготовка (если предусмотрена)	-
- занятия семинарского типа (семинары, <u>практические</u> , <u>лабораторные</u>), в том числе:	36
- практическая подготовка (если предусмотрена)	36
- консультация (предэкзаменационная)	3,25
- промежуточная аттестация по дисциплине	-
Самостоятельная работа обучающихся (час.)	32,75
Форма промежуточной аттестации обучающегося (зачет/экзамен), семестр(ы)	экзамен - 4 семестр

Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий и самостоятельной работы, для каждой формы обучения представлено в таблице 2.2.

Таблица 2.2. Структура и содержание дисциплины (модуля)

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Контактная работа, час.							СР, час.	Итого часов	Форма текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации <i>[по семестрам]</i>
	Л		ПЗ		ЛР		КР/КП			
	Л	в т.ч. ПП	ПЗ	в т.ч. ПП	ЛР	в т.ч. ПП				
Семестр 4.										
Критерии воздействия химических веществ на окружающую среду	2		4		-			4	10	Круглый стол
Общие вопросы токсикологии. Воздействие веществ на экосистемы	2		4		-			4	10	Вопрос - Ответ
Принципы оценки токсичности веществ	4		2		-			4	10	Работа над презентациями
Органические и неорганические токсиканты	4		2		4			4	14	Задачи для самоподготовки
Программное обеспечение квантово-химическое	4		4		4			4	16	Вопрос - Ответ
Компьютерная реализация квантово-химических методов	4		4		4			4	16	Выполнение вычислительного эксперимента (з.е. 1)
Химическая реакция способность молекул	4		4		6			2	16	Выполнение вычислительного эксперимента (з.е.2)
Квантово-химическое описание реакций	4		4		6			2	16	Работа над презентациями
Проведение диагностики молекул с использованием квантово-химических методов исследования	4		4		6			2	16	Индивидуальные задания вычислительного практикума (з.е. 3)
Моделирование межмолекулярных взаимодействий	4		4		6			2,75	16,75	Индивидуальные задания вычислительного практикума (з.е. 4)
Консультации									3,25	
Контроль промежуточной аттестации									-	Экзамен
ИТОГО за семестр:	36		36		36			32,75	140,75	
Итого за весь период	36		36		36			32,75	144	

Примечание: Л – лекция; ПЗ – практическое занятие, семинар; ЛР – лабораторная работа; ПП – практическая подготовка; КР / КП – курсовая работа / курсовой проект; СР – самостоятельная работа

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

Разделы, темы дисциплины	Кол-во часов	Код компетенции	Общее количество компетенций
		ПК-2	
Критерии воздействия химических веществ на окружающую среду	10	+	1
Общие вопросы токсикологии. Воздействие веществ на экосистемы	10	+	1
Принципы оценки токсичности веществ	10	+	1
Органические и неорганические токсиканты	14	+	1
Программное квантово-химическое обеспечение	16	+	1
Компьютерная реализация квантово-химических методов	16	+	1
Химическая реакционная способность молекул	16	+	1
Квантово-химическое описание реакций	16	+	1
Проведение диагностики молекул с использованием квантово-химических методов исследования	16	+	1
Моделирование межмолекулярных взаимодействий	16,75	+	1
Итого	140,75		1

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, п-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

При подготовке к практическим и лабораторным занятиям студентам отводится время на самостоятельную работу в объеме 32,75 часов, которая включает изучение материалов лекционного курса, ознакомление с материалами, изложенными в учебниках и иных источниках информации, включая поисковую работу в интернете, выполнение домашних (задач для самоконтроля) и тестовых заданий. Полезно использовать образовательный портал электронное образование Астраханского государственного университета им. В.Н. Татищева (<http://moodle.asu.edu.ru/>) на котором периодически обновляется информация о текущих заданиях и присутствует необходимый материал по курсу учебной дисциплины и/или

использовать для этих целей общий электронный адрес группы. Также, рекомендуется к ознакомлению курс открытого доступа на образовательной платформе Stepik: «Молекулы и модели: теория и практика» <https://stepik.org/course/143494>. По данной дисциплине предусмотрены лекции согласно ОПОП ВО.

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

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

- Исидоров В.А. Экологическая химия: учеб. пособ. для вузов ... спец. "Охрана окружающей среды и рациональное использование природных ресурсов". - СПб.: Химиздат, 2001. - 304 с.
- 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/>)
- Золотарева Н.В. Молекулы и модели: теория и практика <https://stepik.org/course/143494>
- Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособ. для студентов вузов ... по химическим специальностям. - М.: Академия, 2008. - 384 с.
- Фелленберг Г. Загрязнение природной среды. Введение в экологическую химию - М.: Мир, 1997. - 232 с.
- Ложниченко О.В. Экологическая химия: учебное пособие для вузов / О.В. Ложниченко, И.В. Волкова, В.Ф. Зайцев – М.: Академия, 2008. 272 с.
- 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>
- 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>
- 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>
- 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>
- 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>
- 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>
- 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
Критерии воздействия химических веществ на окружающую среду Мутагенность и канцерогенность. Основные критерии возникновения мутагенеза и канцерогенеза под действием	4	Круглый стол

химических веществ		
<p>Общие вопросы токсикологии. Воздействие веществ на экосистемы</p> <p>Модель элементарной мембраны. Жидкостно-мозаичная модель. Энергетика пассивного и активного транспорта. Перенос веществ через биологические мембраны с помощью переносчиков. Основные структурные особенности ионофоров. Связь между строением веществ и их токсичностью. Действие токсикантов на ферментные системы. Прямое воздействие на ферменты. Воздействие фенолов на живые организмы. Биохимические основы действия фенолов на структурные элементы живых организмов. Поступление в окружающую среду и содержание токсикантов в природных средах. Токсикологические исследования.</p>	4	Вопрос - Ответ
<p>Принципы оценки токсичности веществ</p> <p>Критерии и концепции оценки вещества. Оценки опасности и риска. Оценка химических продуктов с помощью экотоксикологического профильного анализа.</p>	4	Работа над презентациями
<p>Органические и неорганические токсиканты</p> <p>Содержание токсикантов в природных средах. Поведение в окружающей среде и модельных системах. Биологическое действие. Зависимость кожно-раздражающего действия токсикантов и его пороговая концентрация. Действие токсикантов на органы и системы органов.</p>	4	Задачи для самоподготовки
<p>Программное квантово-химическое обеспечение</p> <p>Современное программное обеспечение квантово-химических и молекулярно-динамических расчетов. Определение геометрических параметров молекулярной модели. Измерение связей, углов, торсионных углов и несвязанных атомов. Определение характеристик атомов.</p>	4	Вопрос - Ответ
<p>Компьютерная реализация квантово-химических методов</p> <p>Программы для проведения полуэмпирических расчётов различных молекул, запуск. Расшифровка результатов расчёта. Составление z-матрицы молекул. Оптимизация геометрии различных молекул.</p>	4	Выполнение вычислительного эксперимента (з.е. 1)
<p>Химическая реакционная способность молекул</p> <p>Базисные функции для неэмпирических расчетов. Методы теории функционала плотности. Полуэмпирические методы расчета. Основные требования к полуэмпирическим методам. Принципы параметризации полуэмпирических методов. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Расширенный метод Хюккеля. Точность квантово-химических расчетов химических свойств молекул.</p>	2	Выполнение вычислительного эксперимента (з.е.2)
<p>Квантово-химическое описание реакций</p> <p>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. Правило Вудворда-Хоффмана и его применение для оценки реакционной способности</p>	2	Работа над презентациями

соединений.		
Проведение диагностики молекул с использованием квантово-химических методов исследования Поверхность потенциальной энергии химической реакции. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции. Особые точки равновесных и переходных состояний. Квантово-химическое описание химических реакций в жидкой и твердой фазе. Молекулярный электростатический потенциал. Абсолютная жесткость и абсолютная мягкость молекулярных систем.	2	Индивидуальные задания вычислительного практикума (з.е. 3)
Моделирование межмолекулярных взаимодействий Анализ энергетических и геометрических отклонений в параметрах структур, в зависимости от вида межмолекулярного взаимодействия. Моделирование взаимодействия токсикантов на структурных элементах клеточной мембраны.	2,75	Индивидуальные задания вычислительного практикума (з.е. 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 эксперимента 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 задач вычислительного эксперимента:

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.

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 мини-группах 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			
<i>Тема 1.</i> Концепции и критерии воздействия химических веществ на окружающую среду	Обзорная лекция	Круглый стол (Тематические дискуссии)	Не предусмотрено
<i>Тема 2.</i> Общие вопросы токсикологии. Токсическое воздействие веществ на экосистемы	Лекция-диалог	Вопрос - Ответ (Фронтальный опрос) Работа над презентациями	Не предусмотрено
<i>Тема 3.</i> Органические и неорганические токсиканты	...	Задачи для самоподготовки	Не предусмотрено
Раздел II. Реализация экологических задач современными квантово-химическими методами			
<i>Тема 1.</i> Программное квантово-химическое обеспечение	Обзорная лекция	Вопрос - Ответ (Фронтальный опрос)	
<i>Тема 2.</i> Компьютерная реализация квантово-химических методов расчета	Лекция с применением ИТ. Реализация модуля на платформе STEPIK «Молекулы и модели»	Не предусмотрено	Выполнение вычислительного эксперимента (з.е. 1)
<i>Тема 3.</i> Современные квантово-химические методы		Работа над презентациями	
Раздел III. Корреляционные зависимости между электронной структурой и реакционной способностью рассматриваемого объекта			
<i>Тема 1.</i> Химическая реакционная способность молекул	Лекция с применением ИТ. Реализация модуля на платформе STEPIK «Молекулы и модели»	Выполнение практических заданий	Выполнение вычислительного эксперимента (з.е.2)
<i>Тема 2.</i> Квантово-химическое описание реакций		Работа над презентациями	
Раздел IV. Моделирование процессов взаимодействия химических веществ с биологическими системами			

<i>Тема 1.</i> Проведение диагностики молекул с использованием химических методов исследования	Лекция с применением ИТ. Реализация модуля на платформе STERIK «Молекулы и модели»	Работа над презентациями	Индивидуальные задания вычислительного практикума (з.е. 3)
<i>Тема 2.</i> Моделирование межмолекулярных взаимодействий	Обзорная лекция	Круглый стол (Тематические дискуссии)	Индивидуальные задания вычислительного практикума (з.е. 4)

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);
- 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.

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	Молекулярный конструктор
МОРАС2016	Вычислительная химия

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. Электронно-библиотечная система BOOK.ru <https://book.ru>
5. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» www.studentlibrary.ru Регистрация с компьютеров АГУ
6. Единое окно доступа к образовательным ресурсам <http://window.edu.ru>
7. Министерство науки и высшего образования Российской Федерации <https://minobrnauki.gov.ru>
8. 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 (модуля), результатов обучения по дисциплине (модулю) и оценочных средств

Контролируемый раздел, темы дисциплины	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
Критерии воздействия химических веществ на окружающую среду	<i>ПК-2</i>	Круглый стол
Общие вопросы токсикологии (1.2.). Воздействие веществ на экосистемы (1.3.)	<i>ПК-2</i>	Вопрос - Ответ
Принципы оценки токсичности веществ	<i>ПК-2</i>	Работа над презентациями
Органические и неорганические токсиканты	<i>ПК-2</i>	Задачи для самоподготовки
Программное квантово-химическое обеспечение	<i>ПК-2</i>	Вопрос - Ответ
Компьютерная реализация квантово-химических методов (2.2., 2.3.)	<i>ПК-2</i>	Выполнение вычислительного эксперимента (з.е. 1)
Химическая реакционная способность молекул	<i>ПК-2</i>	Выполнение вычислительного эксперимента (з.е.2)
Квантово-химическое описание реакций	<i>ПК-2</i>	Работа над презентациями
Проведение диагностики молекул с использованием квантово-химических методов исследования	<i>ПК-2</i>	Индивидуальные задания вычислительного практикума (з.е. 3)
Моделирование межмолекулярных взаимодействий	<i>ПК-2</i>	Индивидуальные задания вычислительного практикума (з.е. 4)

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

В таблицах 7–8 приводятся показатели и критерии оценивания компетенций, шкалы 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

§1.1 Концепции и критерии воздействия химических веществ на окружающую среду

1. Темы для подготовки презентаций

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

§1.2 Общие вопросы токсикологии

1. Темы для подготовки презентаций

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

§1.3 Токсическое воздействие веществ на экосистемы

1. Темы для подготовки презентаций

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

§1.4 Принципы оценки токсичности веществ

1. Темы для подготовки презентаций

1. Критерии и концепции оценки вещества. Экспозиция (доза воздействия веществ).
2. 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.chemexper.com/> - поисковая система карт химической безопасности. Содержит информацию о более 70 тысячах химических веществ).
3. Биологическое воздействие химических продуктов. Оценки опасности и риска.
4. Оценка химических продуктов с помощью экотоксикологического профильного анализа.

§1.5 Органические и неорганические токсиканты

1. Темы для подготовки презентаций

- 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

§2.1 Программное квантово-химическое обеспечение

1. Темы для постановки вычислительного эксперимента

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.

§2.2 Компьютерная реализация квантово-химических методов расчета

1. Темы для постановки вычислительного эксперимента

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.

§2.3 Современные квантово-химические методы

1. Темы для подготовки презентаций

- а) Неэмпирические методы расчета: базисные функции атомных орбиталей (базисные наборы).
- б) Методы теории функционала плотности.
- в) Полуэмпирические методы расчета: принципы параметризации.
- г) 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

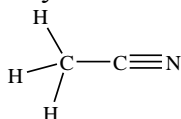
§3.1 Химическая реакционная способность молекул

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.

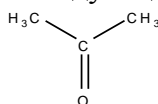
2. Типовые задания для самоподготовки

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



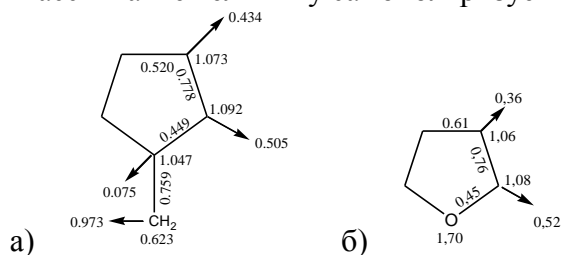
Справка для запоминания: Легковоспламеняющаяся жидкость со слабым эфирным запахом, при воспламенении выделяет токсичные пары цианида водорода и оксиды азота. Токсичность обусловлена способностью образовывать соединения с ионами тяжелых металлов, которые блокируют необходимые для клеточного дыхания ферменты, 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:



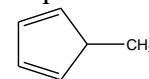
- электронная плотность молекулы;
- порядок π -электронного связывания;
- индекс свободной валентности;
- распределение зарядов на атомах;
- самополяризуемость атомов.

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.

§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

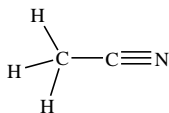
§4.1 Проведение диагностики макромолекулярных систем с использованием квантово-химических методов исследования

1. Индивидуальные задания вычислительного эксперимента (з.е. №1)

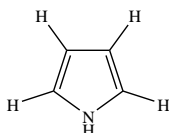
Составление молекулярных диаграмм для несложных молекул и предсказания их реакционной способности с применением метода молекулярных орбиталей Хюккеля и с помощью полуэмпирических и неэмпирических методов. Нахождение порядков связей, индексов свободной валентности, распределения зарядов и других структурных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

Варианты

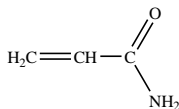
метилциан



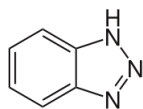
пиррол



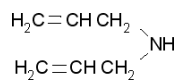
акриламида



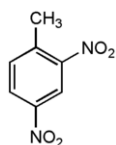
бензотриазол



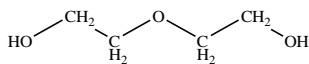
диаллиламин



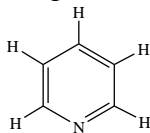
2,4-динитротолуол



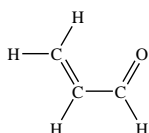
*Диэтиленгликоль



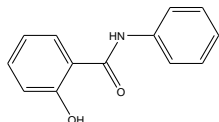
пиридин



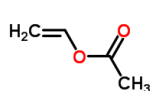
акролеин



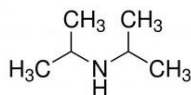
салициланилид



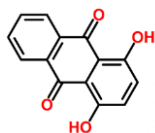
винилацетат



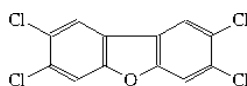
*диизопропиламин



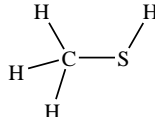
*1,4-дигидроксиантрахинон



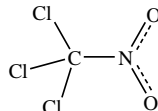
*2,3,7,8-тетрахлордифензофуран



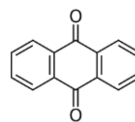
метилмеркаптан



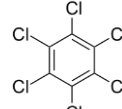
хлорпикрин



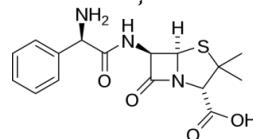
антрахинон



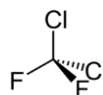
гексахлорбензол



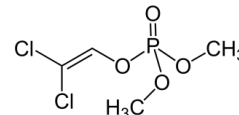
*ампициллин



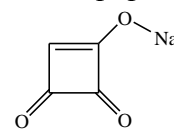
дифтордихлорметан



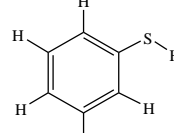
*O,O-диметил-O-2,2-дихлорвинилфосфат



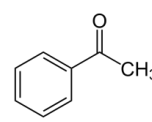
монилиформин



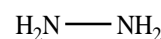
фенилмеркаптан



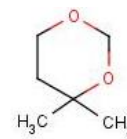
ацетофенон



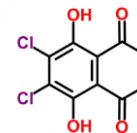
гидразин



*диметилдиоксан



*2,3-Дихлор-1,4-нафтохинон



Примерный план отчета вычислительного лабораторного задания

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.

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.

§4.3 Моделирование межмолекулярных взаимодействий

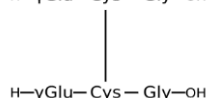
1. Индивидуальные задания вычислительного эксперимента (з.е. №2)

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

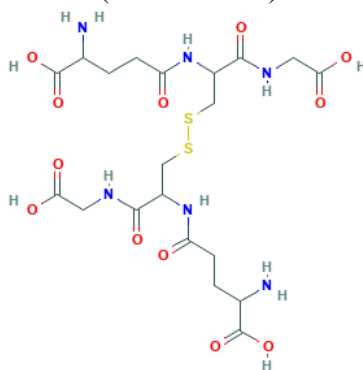
трипептиды

Глутатион



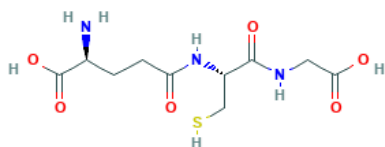
PubChem CID: 975

(окисленный)

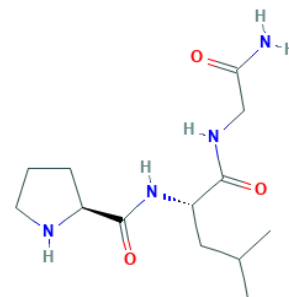


H-gGlu-Cys-Gly-OH
PubChem CID: 124886

(восстановленный)



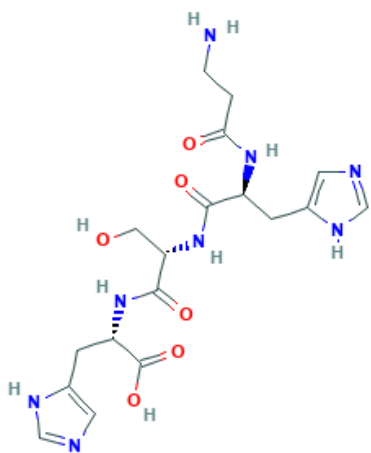
Меланостатин
H-Pro-Leu-Gly-NH₂
PubChem CID: 92910



тетрапептиды

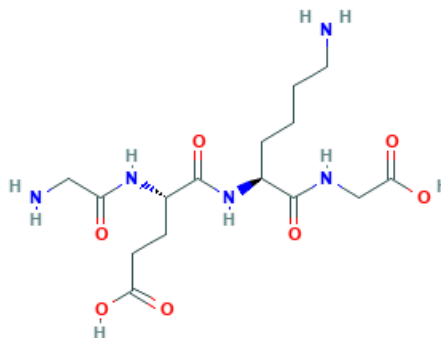
H-βAla-His-Ser-His-OH
PubChem CID: 71587844

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

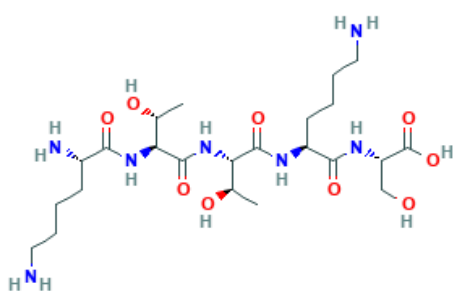


H-Lys-Thr-Thr-Lys-Ser-OH
PubChem CID: 9959565

пептиды

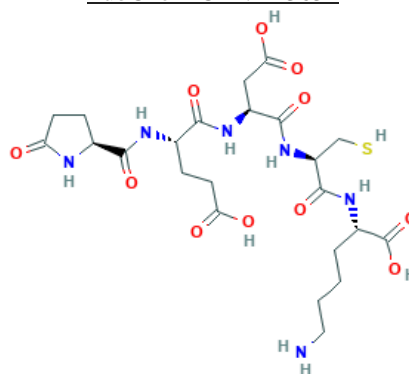


H-Pyr-Glu-Asp-Cys-Lys-OH
PubChem CID: 123651

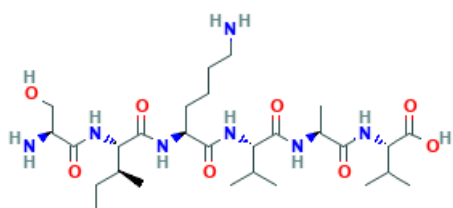


H-Ser-Ile-Lys-Val-Ala-Val-OH
PubChem CID: 10145673

пептиды

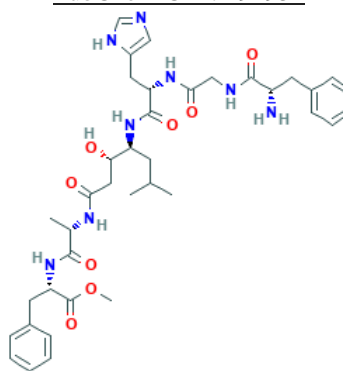


H-Phe-Gly-His-Sta-Ala-Phe-OMe
PubChem CID: 194954



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

пептид



фосфолипиды
 C₃₃H₅₈N₅O₈P
PubChem CID: 135538722

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, $r, \text{Å}$	валентные углы, $\theta, ^\circ$	торсионные углы, $\varphi, ^\circ$	заряд на атомах, $q, \text{a.e.z.}$	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 (HOMO)		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, $\Delta S, \text{Дж/(моль} \cdot \text{K)}$			изменение изобарно-изотермического потенциала, $\Delta G, \text{кДж/моль}$		
273K	298K	318K	273K	298K	318K	273K	298K	318K
...

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

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.

Лабораторно-вычислительная работа на тему:

Прогноз видов биологической активности малых молекул

1. PASSonline (www.way2drug.com/passonline/) предназначен для прогнозирования спектра биологической активности веществ из обучающей выборки, содержащей более 45000 разнообразных биологически активных субстанций известных лекарственных препаратов и фармакологически активных соединений. Для работы с элементами веб-ресурса PASSonline требуется регистрация.
2. Информация на выходе представлена в виде списка прогнозируемых видов активности с оценками вероятности наличия каждого вида активности P_a и вероятности отсутствия каждого вида активности P_i , которые могут принимать значения от нуля до единицы.

Чем больше для конкретной активности значение P_a и чем меньше значение P_i , тем больше шанс обнаружить данную активность в эксперименте и меньше вероятность ложноположительных прогнозов!

3. Исследуйте изомерные и гомологичные соединения. Внесите данные в таблицу вида:

Биологическая активность	Соединение №1		Соединение №2		Соединение №3	
	P_a	P_i	P_a	P_i	P_a	P_i
...

4. Проанализируйте и запишите в выводах: обладают ли выбранные соединения схожими фармакологическими активностями. Наблюдаются ли существенные различия в проявлении вероятных побочных эффектов. В первую очередь какие органы подвергаются воздействию?

Лабораторно-вычислительная работа на тему:

Прогноз острой токсичности малых молекул

1. GUSAR (www.way2drug.com/gusar/acutoxpredict.html) предназначен для создания моделей «Структура – Активность» Quantitative Structure – Activity Relationship / «Структура – Свойство» Quantitative Structure – Property Relationship на основе соответствующих обучающих наборов. Компьютерное моделирование (*In silico*) острой токсичности оценивается на основании значений LD₅₀ (log₁₀(mmol/kg)) для крыс при различных видах введения (перорально, внутривенно, внутрибрюшинно, подкожно, ингаляционно).
2. Исследуйте изомерные и гомологичные соединения. Внесите данные в таблицу вида:

Пути введения	Соединение №1	Соединение №2	Соединение №3
Орально (Перорально)			
mmol/kg (mg/kg)			
Класс опасности			
Внутрибрюшинно			
mmol/kg (mg/kg)			
Класс опасности			
Внутривенно			
mmol/kg (mg/kg)			
Класс опасности			
Подкожно			
mmol/kg (mg/kg)			
Класс опасности			

3. Проанализируйте и запишите в выводах: обладают ли выбранные соединения схожими эффектами токсичности. Наблюдаются ли существенные различия в способах введения. Сделайте вывод о максимальной степени распространения?

Перечень вопросов и заданий, вносимых на экзамен / зачёт / дифференцированный зачёт

1. Молекулярно-биологическое воздействие: мутагенность. Основные критерии возникновения мутагенеза. Модели оценки токсических воздействий.
2. Молекулярно-биологическое воздействие. Основные критерии возникновения канцерогенеза. Модели оценки токсических воздействий.
3. Существующие модели транспорта веществ через клеточные мембраны. Энергетика процессов пассивного и активного транспорта. Перенос веществ через биологические мембраны с помощью переносчиков.
4. Основные структурные особенности ионофоров. Катионная селективность ионофоров. Динамика комплексообразования с ионофорами. Антибиотики-каналообразователи.

5. Поллютанты техногенного происхождения: выбросы в атмосферу. Статистика и многолетняя оценка за качеством воздуха и озонового слоя. Существующие грантовые программы в России и за рубежом по исследованию научными группами способов очистки воздушных потоков.
6. Неорганические и органические загрязнители. Связь между строением веществ и их токсичностью. Действие токсикантов на ферментные системы. Прямое воздействие токсикантов на ферменты.
7. Связь между строением веществ и их токсичностью. Блокирование атомов металлов и цитохромов. Блокирование тиоловых и дитиоловых групп. Воздействие по типу «летального синтеза». Блокирование синтеза белка.
8. Связь между строением веществ и их токсичностью. Повреждение желез внутренней секреции. Механизмы гемолиза. Блокирование сульфгидрильных групп.
9. Ферментативные нарушения в эритроцитах. Нарушение систем, регулирующих уровень пероксида водорода в эритроцитах. Механизмы метгемоглобинообразования.
10. Воздействие фенолов на живые организмы. Биохимические основы действия фенолов на структурные элементы живых организмов.
11. Критерии и концепции оценки вещества. Экспозиция (доза воздействия веществ). Методы прогноза и оценки опасности, риска. Оценка химических продуктов с помощью экотоксикологического профильного анализа.
12. Поведение органических и неорганических токсикантов в окружающей среде и модельных системах. Исследования научных лабораторий в России и за рубежом.
13. Токсикологические исследования. Нормы и дозы при различном поступлении в организм. Биологическое действие. Зависимость кожно-раздражающего действия токсикантов и его пороговая концентрация.
14. Модели действия токсикантов - бромбифенилов и винилхлорида на органы и системы органов. Исследования научных лабораторий в России и за рубежом.
15. Модели действия токсикантов - 1,1-дихлорэтилена, диоксинов на органы и системы органов. Исследования научных лабораторий в России и за рубежом.
16. Модели действия токсикантов - микотоксинов и его производных на органы и системы органов. Исследования научных лабораторий в России и за рубежом.
17. Модели действия токсикантов - изопропаноламинов и органических красителей на органы и системы органов. Исследования научных лабораторий в России и за рубежом.
18. Модели действия токсикантов - поверхностно-активных веществ и их композитов на органы и системы органов. Исследования научных лабораторий в России и за рубежом.

19. Модели действия токсикантов - терпенов на органы и системы органов. Исследования научных лабораторий в России и за рубежом.
20. Модели действия токсикантов - различных групп антибиотиков (пенициллин, тетрациклин, блеомицин) и др. на органы и системы органов. Исследования научных лабораторий в России и за рубежом.
21. Модели действия токсикантов - оксидов серы, азота, сероводорода на органы и системы органов. Исследования научных лабораторий в России и за рубежом.
22. Модели действия токсикантов - цианидов, окислители и др. на органы и системы органов. Исследования научных лабораторий в России и за рубежом.
23. Статические методы и модели прогноза реакционной активности химических соединений. Основные критерии и параметры, вычисляемые в статических методах.
24. Динамические методы и модели прогноза реакционной активности химических соединений. Основные критерии и параметры, вычисляемые в динамических методах.
25. Статистические методы и модели прогноза реакционной активности химических соединений. Основные критерии и параметры, вычисляемые в статистических методах.
26. Низкомолекулярные модели белковых систем: природные трипептиды, тетрапептиды, пентапептиды. Запатентованные пептидные последовательности в косметологии.
27. Участие глутатиона в биохимических окислительных процессах. Исследования научных лабораторий в России и за рубежом.

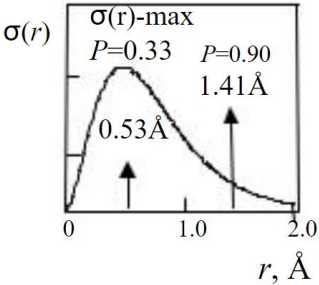
Таблица 9. Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<i>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</i>				
1.	Задание закрытого типа	Волновая функция – это... а) величина, полностью описывающая состояние микрообъекта и любой квантовой системы; б) вероятность нахождения частицы в определенный момент времени t в точке пространства с координатами x, y, z ; в) величина, полностью описывающая состояние макрообъекта; г) функция волны.	а	1
2.		Волновая функция обязана удовлетворять ряду требований (несколько вариантов): а) однозначности и конечности во всем пространстве	в, г	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		<p>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>		
3.		<p>Установите определитель для молекулы изобутена C₄H₈:</p> <p>а) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 1 & 0 & y \end{vmatrix}$</p> <p>б) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}$</p> <p>в) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 1 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 1 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}$</p> <p>г) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 0 & 1 & 1 & y \end{vmatrix}$</p>	а	1
4.		<p>Собственные волновые функции φ_n и φ_m являются ортонормированными, если выполняется условие:</p> <p>а) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = \delta_{mn}$</p> <p>б) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = 0$</p> <p>в) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = 1$</p> <p>г) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau \neq 0$</p>	а	1
5.		<p>Метод молекулярных орбиталей Хюккеля основан на ряде приближений:</p> <p>а) σ-электронным</p>	б	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		б) пренебрежение интегралами межэлектронного отталкивания в) π -электронным		
6.	Задание открытого типа	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 злокачественных новообразований. Подобные факторы называются канцерогенными, а процесс возникновения опухолей в результате их воздействия - канцерогенезом.	5
7.		Составьте систему линейных уравнений для молекулы $\text{CO}(\text{CH}_3)_2$ и опишите, какие параметры включены в описание простого метода Хюккеля	Система МО ЛКАО для молекулы будет иметь следующий вид: $C_1x + C_2 * K + C_3 = 0$ $C_1K + C_2(x + K) + C_3 + C_4 = 0$ $C_2 + C_3x = 0$ $C_2 + C_4x = 0$ В стандартную схему Хюккеля включены следующие параметры: Электронная плотность; заряд, порядковый номер и индекс свободной валентности.	5
8.		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.	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	5-8

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			<p>оси x, а Н будет направлен в третью четверть под углом 104 градуса. Что приблизительно соответствует валентному углу в молекуле воды.</p> <p>Для O¹ координаты соответствуют (0;0;0).</p> <p>Для Cl²:</p> $x=(R(O)+R(Cl))\cdot\cos(0)=$ $=(0,66+0,99)\cdot 1=1,65$ $y=(R(O)+R(Cl))\cdot\sin(0)=$ $=(0,66+0,99)\cdot 0=0$ $z=0.$ <p>Для H³:</p> $x=(R(H)+R(O))\cdot\cos(180-104)=$ $=(0,3+0,66)\cdot 0,24=0,23$ $y=(R(H)+R(O))\cdot\sin(76)=$ $=(0,3+0,66)\cdot 0,97=0,93$ $z=0.$ <p>Следовательно, атомы в молекуле хлорноватистой кислоты имеют следующие декартовы координаты:</p> <p>O¹ (0;0;0) Cl² (1,65;0;0) H³ (0,23;0,93;0)</p>	
9.		<p>Решить задачу и определить вычислительную модель:</p> <p>Электрон заключен в полииновой молекуле длиной 20 нм. Рассчитайте энергию основного состояния?</p>	<p>Движение электрона в полииновой 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:</p> $E_1=(\pi^2\cdot n^2\cdot(h/2\pi)^2)/(2\cdot m_e\cdot a^2).$ <p>Таким образом,</p> $E_1=((3,14)^2\cdot 1^2\cdot(1,054\cdot 10^{-34}\text{ Дж/с}))/((2\cdot 9,11\cdot 10^{-31}\text{ кг})\cdot(20\cdot 10^{-9}\text{ м})^2)=1,503\cdot 10^{-22}\text{ Дж}$	5-8
10.		<p>Ниже представлен график функции радиального распределения электронной</p>	<p>Функция $\sigma(r)$ имеет максимум при $r=0,53\text{ \AA}$, что свидетельствует</p>	5-8

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		<p>плотности для основного состояния атома водорода. О чем свидетельствует максимум на кривой и значение $1,41\text{Å}$?</p> 	<p>максимальной вероятности нахождения электрона на расстоянии отличном 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 отличие от орбиты в классической теории. Для основного состояния атома водорода радиус орбитали составляет $1,41\text{Å}$.</p>	

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

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 (модулю)

№	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий/баллы	Максимальное кол-во баллов	Срок представления
---	----------------------------	------------------------------	----------------------------	--------------------

Основной блок				
1	Посещение занятий	0,5 балла за занятие	18	По расписанию
2	«Активность» студента на занятиях	0,5 балла за занятие		По расписанию
3	Выполнение практических заданий			
3.1	Раскрытие проблемного вопроса вычислительного практикума	0,4 баллов за работу	2	По расписанию
3.2	Обоснованные ответы по актуальным темам	2 балла за занятие	4	По расписанию
3.3	Выполнение вычислительного эксперимента. Отчет по работе	4 балла за отчет	12	По расписанию
4	Индивидуальные задания (4 зач. ед.)	6/6/6/6 баллов за выполненное задание	24	По расписанию
Промежуточный контроль			60	
6	Экзамен	40 баллов	40	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 (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

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

3. 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

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 оборудование. Программа включает в себя материалы вычислительного практикума на ПК для самостоятельной работы студентов.

10. ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) ПРИ ОБУЧЕНИИ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

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. При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья учитываются их индивидуальные психофизические особенности. Обучение инвалидов осуществляется также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида (при наличии).

Для лиц с нарушением слуха возможно предоставление учебной информации в визуальной форме (краткий конспект лекций; тексты заданий, напечатанные увеличенным шрифтом), на аудиторных занятиях допускается присутствие ассистента, а также сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков. Текущий контроль успеваемости осуществляется в письменной форме: обучающийся письменно отвечает на вопросы, письменно выполняет практические задания. Доклад (реферат) также может быть представлен в письменной форме, при этом требования к содержанию остаются теми же, а требования к качеству изложения материала (понятность, качество речи, взаимодействие с аудиторией и т. д.) заменяются на соответствующие требования, предъявляемые к письменным работам (качество оформления текста и списка литературы, грамотность, наличие иллюстрационных материалов и т. д.). Промежуточная аттестация для лиц с нарушениями слуха проводится в письменной форме, при этом используются общие критерии оценивания. При необходимости время подготовки к ответу может быть увеличено.

Для лиц с нарушением зрения допускается аудиальное предоставление информации, а также использование на аудиторных занятиях звукозаписывающих устройств (диктофонов и т. д.). Допускается присутствие на занятиях ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь. Текущий контроль успеваемости осуществляется в устной форме. При проведении промежуточной аттестации для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование по вопросам.

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата, на аудиторных занятиях, а также при проведении процедур текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации могут быть предоставлены необходимые технические средства (персональный компьютер, ноутбук или другой гаджет); допускается присутствие ассистента (ассистентов), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь (занять рабочее место, передвигаться по аудитории, прочитать задание, оформить ответ, общаться с преподавателем).