Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Кафедра химии

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ДИСЦИПЛИНЫ

«Б1.Д.Б.18 Квантовая химия и строение молекул»

Уровень высшего образования

СПЕЦИАЛИТЕТ

Специальность
06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика
(код и наименование специальности)

Биоинженерия
(наименование направленности (профиля)/специализации образовательной программы)

Квалификация
Биоинженер и биоинформатик

Форма обучения
Очная

Год набора 2024

Рабочая программа дисциплины «*Б1.Д.Б.18 Квантовая химия и строение молекул*» рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра химии
наименование кафедры

протокол № 6 от "5" 02 2024.

Заведующий кафедрой
Кафедра химии — подпись — Е.В. Сальникова
наименование кафедры *подпись* *расшифровка подписи*

Исполнители:
Доцент — подпись — С.А. Пешков
должность *подпись* *расшифровка подписи*

должность *подпись* *расшифровка подписи*

СОГЛАСОВАНО:
Председатель методической комиссии по специальности
06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика — личная подпись — Воронцова Е.Г.
код наименование *личная подпись* *расшифровка подписи*

Заведующий отделом формирования фонда и научной обработки документов
личная подпись — Н.Н. Бигалиева
личная подпись *расшифровка подписи*

Уполномоченный по качеству факультета
личная подпись — А.Н. Сизенцов
личная подпись *расшифровка подписи*

№ регистрации 169499

© Пешков С.А., 2024
© ОГУ, 2024

1 Цели и задачи освоения дисциплины

Изучение специальных теоретических курсов, рассматривающих химические и биохимические системы на микро уровне, предполагает проведение полуэмпирических или неэмпирических расчетов электронных характеристик молекул и комплексов. В настоящее время доступно большое количество пакетов программ для квантово-химических расчетов. Каждый из этих пакетов включает набор различных неэмпирических и полуэмпирических методов. В данном модуле будут рассмотрены правила применения различных методов расчета для конкретных биологических систем; рассмотрены возможности различных пакетов программ для квантово-химических расчетов.

Цель (цели) освоения модуля: формирование профессиональных знаний построения биохимических систем и моделирования механизмов химических реакций, каталитических процессов в органической химии и биохимии. Изучение современных полуэмпирических и неэмпирических методов квантовой химии при построении биохимических систем.

Задачи:

- освоить правила применения изучаемых квантово-химических методов, при исследовании различных типов реакций и процессов в биохимии;
- научиться оценивать физико-химические свойства молекул и их комплексов при протекании химических реакций;
- научиться интерпретировать результаты спектральных характеристик моделируемых молекул;
- изучить процедуру оптимизации и порядок вычисления электронных характеристик в неэмпирических методах, принципы работы квантово-химических пакетов программ;
- сформировать представление о роли теоретического анализа;
- сформировать знания об особенностях моделируемых биохимических систем;

2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к базовой части блока Д «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.15 Неорганическая и органическая химия, Б1.Д.Б.16 Аналитическая химия, Б1.Д.Б.17 Химия комплексных соединений*

Постреквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.22 Биохимия патологических процессов, Б1.Д.Б.23 Биоинженерия, Б1.Д.Б.24 Базы данных и основные методы биоинформатики, Б1.Д.В.5 Биоэнергетика*

3 Требования к результатам обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих результатов обучения

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
ОПК-2 Способен использовать специализированные знания фундаментальных разделов математики, физики, химии и биологии для проведения исследований в области	ОПК-2-В-1 Демонстрирует специализированные знания в области фундаментальных разделов математики, физики, химии и биологии	**Знать:** – основные методы и подходы, используемые для анализа биологических данных – основные базы данных, используемые

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
биоинженерии, биоинформатики и смежных дисциплин (модулей)		для решения задач биоинформатики; **Уметь:** – формулировать цели и задачи в области биоинформатики, находить доступные методы исследования; – выбирать, выделять, отделять объекты и предмет биоинформатики в информационной среде; – оформлять, представлять, описывать, характеризовать данные, сведения, факты, результаты работы на языке символов (терминов, формул, образов), введенных и используемых в курсе; – планировать свою деятельность по изучению курса, решению задач курса, исследования актуальных аспектов биоинфоматики; – классифицировать, систематизировать, дифференцировать факты, объекты, методы, решения, задачи и т.д., самостоятельно формулируя основания для этого в отдельных областях биоинформатики; – выбирать способы, методы, приемы, алгоритмы, меры, средства, модели, законы, критерии для решения задач биоинформатики; – обобщать, интерпретировать полученные результаты по заданным или определенным критериям; – контролировать, проверять, осуществлять самоконтроль до, в ходе и

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
		после выполнения работы; – формулировать основные проблемы, вопросы и задачи биоинформатики; – описывать, анализировать большие массивы биологических данных, вносить их в международные базы данных; – использовать полученные знания, навыки и умения в практической деятельности. **Владеть:** – методами анализа биологических данных, в том числе с использованием баз данных и специфического программного обеспечения.
ОПК-7 Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-7-В-2 Демонстрирует теоретические и практические навыки использования современных информационных технологий в области профессиональной деятельности	**Знать:** -основные естественнонаучные законы, используемые для обработки результатов эксперимента в области профессиональной деятельности; – виды информационных и компьютерных технологий; основные понятия информационных систем и баз данных; – основные модели представления данных, состав и основные функции систем управления базами данных. **Уметь:** - проводить первичный поиск информации для решения профессиональ-ных задач;

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
		- осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ информации из различных источников и баз данных; -применять компьютерные технологии для интерпретации результатов химического анализа; -использовать готовые математические модели для обработки массивов экспериментальных данных; -планировать эксперимент, разрабатывать простые математические модели и оценивать их адекватность и точность; **Владеть:** -приемами, применяемыми в компьютерных технологиях для проведения статистической обработки экспериментальных данных, интерпретации полученных результатов; -способами представления научной информации для публикаций, отчетов и конференций - навыками работы с научными и образовательными порталами; – методами информационных технологий; – техническими и программными средствами защиты информации при работе с компьютерными системами; – навыками работы с компьютером для решения профессиональных задач; – базовыми представлениями о работе локальных сетей и сети

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
		интернет; навыками практического использования информационных систем и баз данных, оптимизации их работы.

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы (144 академических часа).

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	4 семестр	всего
Общая трудоёмкость	**144**	**144**
Контактная работа:	**50,5**	**50,5**
Лекции (Л)	16	16
Лабораторные работы (ЛР)	32	32
Консультации	1	1
Индивидуальная работа и инновационные формы учебных занятий	1	1
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,5	0,5
Самостоятельная работа: *- выполнение курсовой работы (КР);* *- самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий;* *- изучение разделов курса в системе электронного обучения;* *- подготовка к лабораторным занятиям;* *- подготовка к рубежному контролю и т.п.)*	**93,5** +	**93,5**
Вид итогового контроля (зачет, экзамен, дифференцированный зачет)	**экзамен**	

Разделы дисциплины, изучаемые в 4 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Теоретические основы квантовой механики	17	2	2	12	1
2	Операторы и действия над ними	20	2	4	12	2
3	Волновая функция	19	2	2	12	3
4	Атом водорода	22	2	4	12	4
5	Приближении квантовой химии	33	4	4	20	5
6	Квантово-химические методы расчета электронной структуры	54	4	16	28	6
	Итого:	144	16		32	96
	Всего:	144	16		32	96

4.2 Содержание разделов дисциплины

№ 1 Теоретические основы квантовой механики. Предпосылки возникновения квантовой механики. Матричная механика Гейзенберга. Уравнение Шреденгера. Принцип неопределенности Гейзенберга.

№ 2 Операторы и действия над ними. Свойства С.Ф. и С.З. эрмитовых операторов. Операторы импульса, момента импульса, энергии. Матричное представление операторов.

№ 3 Волновая функция. Статистический смысл волновой функции. Условия одновременного определения двух физических величин. Свободное движение частицы. Волны Де Бройля. Частица в потенциальном ящике с бесконечно высокими стенами. Потенциальный барьер. Гармонический осциллятор.

№ 4 Атом водорода. Частица в центрально симметричном поле. Жесткий ротатор. Атом водорода (разделение переменных). Радиальная часть (полиномы Лагерра). Сферическая часть (шаровые функции, полиномы Лежандра). Форма электронных облаков. Спин электрона. Операторы спина. Одноэлектронные спиновые функции.

№ 5 Приближения квантовой химии. Многоэлектронный атом. А.О. Слейтера. Приближения квантовой химии: одноэлектронное приближение (детерминант Слейтера), вариационный принцип (вывод секулярных уравнений). Метод ВС. Молекула и химическая связь. Метод МО. Симметрия и диаграмма МО 2-х атомных гомоядерных молекул. Молекулярные параметры.

№ 6 Квантово-химические методы расчета электронной структуры. Метод Хюккеля. Расчет электронных свойств биологических молекул. Проблема гетероатомов. Применение элементов симметрии при упрощении детерминанта Хюккеля. Уравнения Хартри-Фока. Метод самосогласованного поля (ССП). Метод конфигурационного взаимодействия (КВ). Полуэмпирические и неэмпирические методы квантовой химии.

4.3 Лабораторные работы

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
1	1	Знакомство с программой HyperChem, базы данных, построение молекул.	2
2	2-5	Создание собственной выборки в Excel, расчет молекул с помощью методов молекулярной механики.	2
3	2-5	Расчет молекул методами полуэмпирики, визуализация молекулярных орбиталей.	2
4	4,5	Расчет молекул неэмпирическими методами.	2
5	1-5	Семинар. Сравнительный анализ между различными методами и экспериментом.	2
6	6	Учет сольватационных эффектов.	2
7	6	Построение карты электростатического потенциала (МЭП)	2
8	6	Расчет молекул при различных температурах.	2
9	6	ИК-спектры, ЯМР-спектры.	2
10	6	Построение сечения ППЭ для одной связи, двух связей, химической реакции.	2
11	6	Расчет энергии активации.	2
12	5	Симметрия, создание Z-матрицы.	2
13	6	Конформационный анализ. Гомологи.	2
14	6	Термодинамические циклы.	2
15	6	Моделирование реакции диссоциации протона водорода	2
16	5	Вариационный принцип. Секулярные уравнения.	2
		Итого:	32

4.4 Курсовая работа (4 семестр)

1. Квантовохимическое исследование реакции взаимодействия аминокислот с металлами
2. Анализ антиоксидантных и прооксидантных свойств аминокислот с помощью квантовохимических методов
3. Моделирование реакций взаимодействия субстрата с активным центром фермента
4. Определение энергий и времени жизни интермедиатов химических реакций
5. Устойчивость комплексов тяжелых металлов с биологическими молекулами
6. Структурные и спектральные свойства химический соединений
7. Исследование флуоресценции и времени жизни возбужденных состояний биомолекул
8. Установление пути протекания химической реакции с определением геометрических параметров промежуточных структур биомолекул.
9. Построение трехмерных профилей сечения ППЭ реакций с биологическими молекулами
10. Исследованием механизмов биологических реакций с анализом термодинамических величин

5.1 Основная литература

1. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия: учеб. для хим. спец. вузов / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко.- 7-е изд., стер. - М. : Высш. шк., 2009. - 528 с.
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие для вузов / А. И. Ермаков. - М. : Юрайт, 2010. - 556 с.
3. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности ВПО 020101.65 - "Химия" / А. И. Ермаков. - Москва : Юрайт, 2015. - 556 с. : ил. - (Основы наук). - Библиогр.: с. 508-516. - Прил.: с. 517-539. - Предм. указ.: с. 540-555. - ISBN 978-5-9916-0587-8.
4. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учебное пособие / В. И. Барановский.- 2-е изд., испр. и доп. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 427 с. : ил. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Прил.: с. 407-420. - Библиогр.: с. 421. - ISBN 978-5-8114-2340-8.

5.2 Дополнительная литература

1. Степанов Н.Ф, Квантовая механика и квантовая химия М.: Мир, Изд. МГУ 2001. 519 с.
2. Пешков, С. А. Теоретические основы квантовой и физической химии [Электронный ресурс] : учебное пособие для обучающихся по программам высшего образования по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, и по направлению подготовки 04.03.01 Химия / С. А. Пешков; М-во науки и высш. образования Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Электрон. текстовые дан. (1 файл: 5.05 Мб). - Оренбург : ОГУ, 2021. - 111 с. - Загл. с тит. экрана. - Adobe Acrobat Reader 7.0. - Режим доступа: http://artlib.osu.ru/web/books/metod_all/143286_20210602.pdf

5.3 Периодические издания

1. Успехи химии: журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
2. Кинетика и катализ: журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
3. Известия РАН, сер. Химическая: журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
4. Доклады академии наук (ДАН) : журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
5. Журнал неорганической химии: журнал. - М.: АРСМИ
6. Журнал физической химии. - М.: Агентство "Роспечать".

5.4 Интернет-ресурсы

1. Сайт Гигапедия. Книги по химии на английском языке; книги по квантовой химии, спектроскопии djvu-inf.narod.ru/nclib.html
2. База данных о рентгеноструктурном анализе соединений и атомных термах NIST www.nist.gov > PML > Publications
3. Quantum Chemistry with Wavefunction Spartan www.computational-chemistry.co.uk
4. Quantum Chemistry Software - MOLCAS www.molcas.org/introduction.html
5. Официальный сайт А.А. Грановского http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html
6. Научная электронная библиотека - http://elibrary.ru/defaultx.asp.
7. Электронная библиотека Российской государственной библиотеки (РГБ) - http://elibrary.rsl.ru/.
8. Мировая цифровая библиотека - http://www.wdl.org/ru/.
9. Публичная Электронная Библиотека (области знания: гуманитарные и естественнонаучные) - http://lib.walla.ru/.
10. Электронная библиотека IQlib (образовательные издания, электронные учебники, справочные и учебные пособия) - http://www.iqlib.ru/.
11. Электронная библиотека Санкт-Петербургского государственного политехнического университета (методическая и учебная литература, создаваемая в электронном виде авторами СПбГТУ по профилю образовательной и научной деятельности университета) - http://www.unilib.neva.ru/rus/lib/resources/elib/.
12. Научная библиотека МГУ имени М.В. Ломоносова - http://nbmgu.ru/

5.5 Программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. ГАРАНТ Платформа F1 [Электронный ресурс]: справочно-правовая система. / Разработчик ООО НПП «ГАРАНТ-Сервис», 119992, Москва, Воробьевы горы, МГУ, [1990–2019]. – Режим доступа в сети ОГУ для установки системы: \\fileserver1\GarantClient\garant.exe
2. Консультант Плюс [Электронный ресурс]: электронное периодическое издание справочная правовая система. / Разработчик ЗАО «Консультант Плюс», [1992–2019]. – Режим доступа к системе в сети ОГУ для установки системы: \\fileserver1\!CONSULT\cons.exe
3. Операционная система РЕД ОС
4. Пакет офисных приложений LibreOffice
5. Программная система для организации видео-конференц-связи «МТС Линк»
6. Автоматизированная интерактивная система сетевого тестирования - АИССТ (зарегистрирована в РОСПАТЕНТ, Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011610456, правообладатель – Оренбургский государственный университет), режим доступа - http://aist.osu.ru.

6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Аудитории оснащены комплектами ученической мебели, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории. Для проведения лабораторных работ по курсу химии каждая лаборатория оборудована:

1) Вытяжным шкафом;

2) Рабочими столами;

3) Штативами для индивидуального набора реактивов и лабораторных принадлежностей;

4) Штативы с пробирками;

5) Набором оборудования общего пользования (эксикатор, кристаллизатор, промывалки, пинцет,
тигельные щипцы, ерши для мытья посуды);

6) Наборами химической посуды;

7) Приборами (сушильный шкаф, муфельная печь, аналитические весы, РН-метр фотоэлектроколориметр,)

8) Таблицами и плакатами.

9) Набором необходимых химических реактивов. В лабораториях предусмотрены аптечка, , индивидуальные средства защиты, а также средства пожаротушения.

Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой, подключенной к сети "Интернет", и обеспечением доступа в электронную информационнообразовательную среду ОГУ.