Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет имени В.А. Бондаренко»

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 2026

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 "09" 02 2026 г.

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 — Бернсиева Е.С.
код наименование *личная подпись* *расшифровка подписи*

Заведующий отделом формирования фонда и научной обработки документов
ведущий библиограф — личная подпись — Г.Е. Гасойтина
личная подпись *расшифровка подписи*

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

№ регистрации 188684

© Пешков С.А., 2026
© ОГУ, 2026

1 Цели и задачи освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Квантовая химия и строение молекул» является формирование у обучающихся теоретических знаний и практических навыков применения квантово-механических представлений и компьютерного моделирования для анализа строения, свойств и реакционной способности молекулярных систем, значимых для биоинженерии и биоинформатики.

Задачи:

1) теоретический компонент: знать физические и математические основы квантово-механического описания атомов, молекул и химической связи; знать принципы выбора расчетного метода, базисного набора, заряда, мультиплетности и параметров расчета.

2) познавательный компонент: понимать возможности и ограничения квантово-химических методов; иметь представление о применении расчетно-теоретических подходов при интерпретации структуры, свойств и реакционной способности биомолекул.

3) практический компонент: уметь формулировать расчетную задачу, строить молекулярную модель и подготавливать данные для расчета; уметь интерпретировать расчетные результаты; владеть навыками оформления расчетных данных в виде таблиц, графиков, схем и кратких отчетов.

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 биоинженерии, биоинформатики и смежных дисциплин (модулей)	ОПК-2-В-1 Демонстрирует специализированные знания в области фундаментальных разделов математики, физики, химии и биологии	**Знать:** основы квантово-механического описания атомов, молекул и химической связи; параметры молекулярных систем: геометрию, энергию, заряды, орбитали и спектральные характеристики. **Уметь:** применять физико-химические представления для анализа строения и свойств молекул; интерпретировать результаты расчетов в задачах биоинженерии и биоинформатики. **Владеть:** навыками анализа электронного строения и оформления расчетных данных.

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
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:** возможности ПО для молекулярной визуализации, подготовки расчетов и обработки результатов; правила работы с цифровыми моделями и химическими базами данных. **Уметь:** строить молекулярные модели, подготавливать исходные данные и анализировать результаты расчетов; использовать интернет-ресурсы и базы данных в учебных и профессиональных задачах. **Владеть:** приемами работы с программами молекулярного моделирования и электронного оформления результатов.

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:	**49,25**	**49,25**
Лекции (Л)	16	16
Лабораторные работы (ЛР)	32	32
Консультации	1	1
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25
Самостоятельная работа: - самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала, материалов учебников и учебных пособий); - изучение разделов курса в системе электронного обучения; - подготовка к лабораторным работам; - подготовка к рубежному контролю и промежуточной аттестации.	**94,75**	**94,75**
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	Базовые физико-математические основы квантовой химии	18	2		4	12
2	Квантово-механическое описание атомов и простых молекул	18	2		4	12
3	Химическая связь, электронное строение и геометрия молекул	18	2		4	12
4	Приближенные методы решения молекулярного уравнения Шредингера	18	2		4	12
5	Расчетные модели молекулярных систем и молекулярные свойства	18	2		4	12
6	Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии	18	2		4	12
7	DFT, базисные наборы и расчет характеристик биомолекул	18	2		4	12
8	Интерпретация и оформление результатов квантово-химических расчетов	18	2		4	12
	Итого:	144	16		32	96
	Всего:	144	16		32	96

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1 Базовые физико-математические основы квантовой химии

Предмет и задачи квантовой химии. Корпускулярно-волновой дуализм, волновая функция, операторный подход и вероятностная интерпретация квантово-механического описания. Уравнение Шредингера, квантовые числа, энергетические уровни и основные приближения при описании атомно-молекулярных систем.

Раздел 2 Квантово-механическое описание атомов и простых молекул

Атомные орбитали, электронные конфигурации, спиновые состояния и принципы заполнения электронных уровней. Модельные задачи квантовой химии, описание простых молекул, связь электронного строения с геометрией и энергетическими характеристиками.

Раздел 3 Химическая связь, электронное строение и геометрия молекул

Ковалентная, ионная, координационная и водородная связь в рамках квантово-химического описания. Молекулярные орбитали, электронная плотность, распределение зарядов, дипольный момент, электростатический потенциал. Роль пространственного строения молекул в биологически значимых взаимодействиях.

Раздел 4 Приближенные методы решения молекулярного уравнения Шредингера

Приближение Борна-Оппенгеймера, вариационный принцип, метод самосогласованного поля, метод Хартри-Фока и основы метода функционала электронной плотности. Базисные наборы, заряд и мультиплетность молекулярной системы. Возможности и ограничения расчетных моделей.

Раздел 5 Расчетные модели молекулярных систем и молекулярные свойства

Подготовка молекулярной геометрии, выбор расчетной модели, оптимизация структуры, анализ энергетических, электронных и спектральных параметров. Расчет колебательных частот, моделирование ИК-спектров и первичная интерпретация расчетных данных.

Раздел 6 Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии

Сравнение неэмпирических, полуэмпирических и молекулярно-механических подходов. Выбор метода с учетом размера системы, требуемой точности и доступных вычислительных ресурсов. Практическое использование расчетов для органических и биологически значимых молекул.

Раздел 7 DFT, базисные наборы и расчет характеристик биомолекул

Метод функционала электронной плотности, распространенные функционалы и базисные наборы. Расчет HOMO и LUMO, молекулярных зарядов, конформаций, геометрических параметров и спектральных характеристик. Анализ взаимодействий биомолекул с ионами металлов и функциональными группами.

Раздел 8 Интерпретация и оформление результатов квантово-химических расчетов

Обработка результатов расчетов: координаты, энергии, заряды, молекулярные орбитали, электростатический потенциал, спектральные данные и графические материалы. Оформление расчетного протокола, таблиц, схем, рисунков и краткого научного отчета. Проверка корректности расчетной модели и воспроизводимость вычислительного исследования.

4.3 Лабораторные работы

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
1	1	Работа с программами молекулярной визуализации. Построение моделей простых молекул и биологически значимых фрагментов	4
2	2	Квантово-механическое описание атомов и простых молекул. Анализ атомных и молекулярных орбиталей	4
3	3	Оптимизация геометрии молекулы и оценка параметров химической связи	4
4	4	Подготовка входных данных для квантово-химического расчета: метод, базисный набор, заряд и мультиплетность	4
5	5	Расчет и визуализация молекулярных орбиталей, распределения зарядов и молекулярного электростатического потенциала	4
6	6	Расчет колебательных частот и моделирование ИК-спектра органической или биологически значимой молекулы	4
7	7	Моделирование взаимодействий биологически значимой молекулы с ионом металла или функциональной группой	4
8	8	Подготовка итогового расчетного отчета по строению и свойствам выбранной биологически значимой молекулы	4
		Итого:	32

5 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

5.1 Основная литература

1. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие для вузов / В. И. Барановский. — 5-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2025. — 428 с. — ISBN 978-5-507-51139-6. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/505847.
2. Игнатов, С. К. Квантовая химия. Химическая связь и теория молекул : учебное пособие / С. К. Игнатов. — Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2016. — 136 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/153007.
3. 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. дан. — Оренбург : ОГУ, 2021. — 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). — Загл. с этикетки диска. — Систем. требования: IBM PC 686 (Pentium или выше) ; Microsoft Windows NT5.x (2000, XP, 7, 8, 10) ; 512 Мб ; монитор, поддерживающий режим 1024x768 ; мышь или аналогич. устройство. — Режим доступа: http://artlib.osu.ru/web/books/metod_all/143286_20210602.pdf. — ISBN 978-5-7410-2586-4.
4. Пешкова, Т. В. Квантовая и компьютерная химия : практикум / Т. В. Пешкова, С. А. Пешков. — Оренбург : Оренбургский государственный университет, 2024. — 130 с. — ISBN 978-5-7410-3310-4. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/503245.

5.2 Дополнительная литература

1. Бурмистрова, Н. А. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / Н. А. Бурмистрова. — Саратов : СГУ, 2020. — 68 с. — ISBN 978-5-292-04636-3. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/170586.
2. Игнатов, С. К. Задачи по квантовой химии : учебно-методическое пособие / С. К. Игнатов. — Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2015. — 28 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/153008.
3. Романова, К. А. Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств химических соединений : учебное пособие / К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов. — Казань : КНИТУ, 2021. — 84 с. — ISBN 978-5-7882-3054-2. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/330935.

5.3 Периодические издания

1. Вестник нанотехнологий.
2. Химическая промышленность сегодня.
3. Химическая технология.
4. Экология и промышленность России.

5.4 Интернет-ресурсы

1. PubChem — открытая справочная база данных химических соединений и биологической активности малых молекул. — Режим доступа: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/.
2. NIST Chemistry WebBook — справочная база термохимических, спектральных и ионно-энергетических данных химических соединений. — Режим доступа: https://webbook.nist.gov/.
3. NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database — справочная база экспериментальных и расчетных данных для сопоставления квантово-химических методов. — Режим доступа: https://cccbdb.nist.gov/.
4. RCSB Protein Data Bank — база пространственных структур биомакромолекул и комплексов. — Режим доступа: https://www.rcsb.org/.

5. LibreTexts Chemistry Library — учебные материалы по физической и квантовой химии. — Режим доступа: https://chem.libretexts.org/.

6. MolView — виртуальная среда построения и визуализации молекулярных структур. — Режим доступа: https://molview.org/.

5.5 Программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы современных информационных технологий

1. Операционная система РЕД ОС. — Режим доступа: https://redos.red-soft.ru/.

2. Пакет офисных приложений «МойОфис Образование». — Режим доступа: https://myoffice.ru/products/education/.

3. Для работы с ресурсами Интернет — веб-браузер Яндекс. — Режим доступа: https://yandex.ru/.

4. ГАРАНТ Платформа F1 [Электронный ресурс]: справочно-правовая система. — Режим доступа в сети ОГУ: http://garant.net.osu.ru.

5. Консультант Плюс [Электронный ресурс]: справочно-правовая система. — Режим доступа в сети ОГУ: http://www.consultant.ru/.

6. Антиплагиат.Структура 5.0. — Режим доступа: https://osu.antiplagiat.ru/.

7. Автоматизированная интерактивная система сетевого тестирования — АИССТ. — Режим доступа: https://osu.aist.ru/.

8. Электронные курсы ОГУ в системе обучения Moodle. — Режим доступа: http://moodle.osu.ru/.

9. Платформа сопровождения экзаменационных испытаний с использованием дистанционных образовательных технологий. — Режим доступа: https://exam.osu.ru/.

10. ЭБС «Лань». — Режим доступа: https://e.lanbook.com/.

11. ЭБС «Университетская библиотека онлайн». — Режим доступа: https://biblioclub.ru/.

12. ИВИС. — Режим доступа: https://eivis.ru/browse/udb/12.

13. Научная библиотека ОГУ. — Режим доступа: https://lib.osu.ru/.

14. Avogadro — свободно распространяемая программа для молекулярного моделирования и визуализации. — Режим доступа: https://avogadro.cc/.

15. Jmol/JSmol — свободно распространяемые средства визуализации молекулярных структур. — Режим доступа: https://www.jmol.org/.

16. ChemSketch Freeware — свободно распространяемая программа для построения химических структур при некоммерческом академическом использовании. — Режим доступа: https://www.acdlabs.com/resources/free-chemistry-software-apps/chemsketch-freeware/.

17. ORCA — свободно распространяемый для академического использования программный пакет квантово-химических расчетов. — Режим доступа: https://orcaforum.kofo.mpg.de/.

18. Gabedit — свободно распространяемая программа для подготовки и визуализации квантово-химических расчетов. — Режим доступа: https://gabedit.sourceforge.net/.

19. Python — свободно распространяемый язык программирования и среда обработки расчетных данных. — Режим доступа: https://www.python.org/.

6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, лабораторных занятий компьютерного профиля, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации оснащены комплектами ученической мебели, техническими средствами обучения, мультимедийным оборудованием и доступом к электронной информационно-образовательной среде ОГУ.

Для проведения лабораторных работ используется компьютерный класс с персональными компьютерами, доступом к сети Интернет, программным обеспечением для молекулярной визуализации, подготовки расчетных заданий, квантово-химических расчетов и обработки результатов: Avogadro, Jmol/JSmol, ChemSketch Freeware, ORCA, Gabedit, Python, а также офисными средствами подготовки таблиц, графиков, схем и отчетов.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой, подключенной к сети Интернет, и обеспечивают доступ к ЭИОС ОГУ, электронным библиотечным системам, профессиональным базам данных и информационным справочным системам.