

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Моделирование квантово-химическими методами структур и перспективных материалов фармацевтики и биотехнологий

**Код модуля**  
1161181(1)

**Модуль**  
Молекулярное моделирование в разработке инновационных лекарственных средств и перспективных материалов

**Екатеринбург**

Оценочные материалы составлены автором(ами):

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Иванова Алла Владимировна	доктор химических наук, доцент	Профессор	аналитической химии
2	Козицина Алиса Николаевна	доктор химических наук, доцент	заведующий кафедрой	аналитической химии
3	Сараева Светлана Юрьевна	кандидат химических наук, доцент	доцент	аналитической химии
4	Цмокалюк Антон Николаевич	без ученой степени, без ученого звания	Преподаватель	аналитической химии

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

С.А. Иванченко

**Авторы:**

- Козицина Алиса Николаевна, заведующий кафедрой, аналитической химии
- Цмокалюк Антон Николаевич, Преподаватель, аналитической химии

## 1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Моделирование квантово-химическими методами структур и перспективных материалов фармацевтики и биотехнологий

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	3	
2.	Виды аудиторных занятий	Лекции Практические/семинарские занятия Лабораторные занятия	
3.	Промежуточная аттестация	Экзамен	
4.	Текущая аттестация	Контрольная работа	1
		Коллоквиум	1
		Отчет по лабораторным работам	7

## 2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ Моделирование квантово-химическими методами структур и перспективных материалов фармацевтики и биотехнологий

Индикатор – это признак / сигнал/ маркер, который показывает, на каком уровне обучающийся должен освоить результаты обучения и их предъявление должно подтвердить факт освоения предметного содержания данной дисциплины, указанного в табл. 1.3 РПМ-РПД.

Таблица 1

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)	Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине
1	2	3
ПК-3 -Способен проводить валидацию методик контроля качества сырья, материалов, производственной среды и лекарственных средств (Живые системы. Перспективные химико-фармацевтические и	З-3 - Сформулировать принципы разработки и постановки на производство новых лекарственных средств (фармакологические, фармацевтические аспекты и технологические аспекты) З-4 - Привести стратегии создания новых лекарственных препаратов З-5 - Представлять основные химические, физические и технические аспекты	Коллоквиум Лабораторные занятия Отчет по лабораторным работам № 1 Отчет по лабораторным работам № 2 Отчет по лабораторным работам № 3 Отчет по лабораторным работам № 4 Отчет по лабораторным работам № 5

<p>биотехнологии: исследования и разработки)</p>	<p>химического промышленного производства лекарственных веществ с учетом сырьевых и энергетических затрат  П-3 - Разрабатывать рекомендации к рецептуре нового фармацевтического состава и его лекарственной формы  П-4 - Производить анализ существующего процесса производства лекарственных средств для определения возможных решений его оптимизации  П-5 - Структурировать научный поиск при синтезе новых органических соединений  У-3 - Правильно интерпретировать полученные знания об основах фармакокинетики и фармакодинамики  У-4 - Прогнозировать биологическую активность исходя из химической структуры вещества  У-5 - Распознавать структурные фрагменты в молекулах органических соединений, определяющие их фармакологическое действие</p>	<p>Отчет по лабораторным работам № 6  Отчет по лабораторным работам № 7  Экзамен</p>
<p>ПК-6 -Способен организовать проведение контроля качества лекарственных средств на всех стадиях производства (Живые системы. Перспективные химико-фармацевтические и биотехнологии: исследования и разработки)</p>	<p>З-2 - Изложить основные принципы организации химического производства, его структуры, методы оценки эффективности производства  П-1 - Осуществлять сбор информации и её анализ о методах получения и выращивания новых культур растительных и животных клеток с целью получения БАВ при выполнении и руководстве НИР  П-2 - Предлагать методы управления действующими технологическими процессами производства органических веществ, обладающих различной активностью,</p>	<p>Коллоквиум  Контрольная работа  Лабораторные занятия  Лекции  Практические/семинарские занятия  Экзамен</p>

	<p>обеспечивающими выпуск продукции, отвечающей требованиям стандартов</p> <p>У-2 - Применять методы и алгоритмы оптимизации, а также соответствующие пакеты прикладных программ для проектирования и управления химическим производством</p> <p>У-3 - Выбирать оптимальные методы синтеза целевых продуктов, соответствующее оборудование, вспомогательные процедуры, мероприятия, обеспечивающие технику безопасности и меры, предусматривающие охрану окружающей среды</p> <p>У-6 - Систематизировать информацию о контроле качества исходного сырья и вспомогательных материалов, реализуемых при различных системах качества на предприятии</p>	
<p>ПК-14 -Способен разрабатывать техническую документацию проектных работ и проектировать опытные, опытно-промышленные и промышленные установки биотехнологического производства (Живые системы. Перспективные химико-фармацевтические и биотехнологии: исследования и разработки)</p>	<p>З-1 - Перечислять и дать краткую характеристику основного технологического оборудования и вспомогательных систем, использующихся в выполняемом технологическом процессе</p> <p>П-1 - Выполнять разработку, технологических инструкций производства лекарственных средств</p> <p>У-1 - Учитывать записи по работоспособности технологического оборудования и помещений, используемых в технологическом процессе</p>	<p>Контрольная работа</p> <p>Лекции</p> <p>Практические/семинарские занятия</p> <p>Экзамен</p>

**3. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ В БАЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЕ (ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА БРС)**

### 3.1. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

<b>1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.4</b>		
<b>Текущая аттестация на лекциях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>контрольная работа</i>	2,7	80
<i>конспекты лекций</i>	2,9	20
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.4</b>		
<b>Промежуточная аттестация по лекциям – экзамен</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.6</b>		
<b>2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 0.2</b>		
<b>Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>коллоквиум</i>	2,8	50
<i>практическая работа</i>	2,15	50
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – 1</b>		
<b>Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – нет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрено</b>		
<b>3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – 0.4</b>		
<b>Текущая аттестация на лабораторных занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>отчет по лабораторным работам</i>	2,9	10
<i>отчет по лабораторным работам</i>	2,10	15
<i>отчет по лабораторным работам</i>	2,11	15
<i>отчет по лабораторным работам</i>	2,12	15
<i>отчет по лабораторным работам</i>	2,13	15
<i>отчет по лабораторным работам</i>	2,14	15
<i>отчет по лабораторным работам</i>	2,15	15
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – 1</b>		
<b>Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям –</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено</b>		
<b>4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий – не предусмотрено</b>		
<b>Текущая аттестация на онлайн-занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>

<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям - не предусмотрено</b>		
<b>Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено</b>		

### 3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<b>Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– не предусмотрено</b>		
<b>Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – не предусмотрено</b>		

## 4. КРИТЕРИИ И УРОВНИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

4.1. В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре/институте критерии (признаки) оценивания достижений студентов по дисциплине модуля (табл. 4) в рамках контрольно-оценочных мероприятий на соответствие указанным в табл.1 результатам обучения (индикаторам).

Таблица 4

### Критерии оценивания учебных достижений обучающихся

Результаты обучения	Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам
Знания	Студент демонстрирует знания и понимание в области изучения на уровне указанных индикаторов и необходимые для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Умения	Студент может применять свои знания и понимание в контекстах, представленных в оценочных заданиях, демонстрирует освоение умений на уровне указанных индикаторов и необходимых для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Опыт /владение	Студент демонстрирует опыт в области изучения на уровне указанных индикаторов.
Другие результаты	Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов. Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения. Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.

4.2 Для оценивания уровня выполнения критериев (уровня достижений обучающихся при проведении контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля) используется универсальная шкала (табл. 5).

## Шкала оценивания достижения результатов обучения (индикаторов) по уровням

Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)				
№ п/п	Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание)	Шкала оценивания		
		Традиционная характеристика уровня		Качественная характеристика уровня
1.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты в полном объеме, замечаний нет	Отлично (80-100 баллов)	Зачтено	Высокий (В)
2.	Результаты обучения (индикаторы) в целом достигнуты, имеются замечания, которые не требуют обязательного устранения	Хорошо (60-79 баллов)		Средний (С)
3.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты не в полной мере, есть замечания	Удовлетворительно (40-59 баллов)		Пороговый (П)
4.	Освоение результатов обучения не соответствует индикаторам, имеются существенные ошибки и замечания, требуется доработка	Неудовлетворительно (менее 40 баллов)	Не зачтено	Недостаточный (Н)
5.	Результат обучения не достигнут, задание не выполнено	Недостаточно свидетельств для оценивания		Нет результата

## 5. СОДЕРЖАНИЕ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

### 5.1. Описание аудиторных контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля

#### 5.1.1. Лекции

Самостоятельное изучение теоретического материала по темам/разделам лекций в соответствии с содержанием дисциплины (п. 1.2. РПД)

#### 5.1.2. Практические/семинарские занятия

Примерный перечень тем

1. Квантование энергии. Квантовые состояния. Метод МО
2. Обзор ПО для редактирования структуры молекул, разных типов расчетов, визуализации результатов
3. Выбор метода расчета для (азоло-азинов, хиноксалинов)
4. Выбор базисного набора. Количество функций для различных базисных наборов
5. Анализ расчетов оптимизированных структур, колебательных частот, электронной плотности, распределения зарядов для оценки физико-химических свойств на примере молекул



### Примерные задания

1. Продолжите утверждение: Волновая функция должна быть ...
  - непрерывной,
  - однозначной,
  - нормируемой.
2. Продолжите утверждение: Метод молекулярных орбиталей предполагает, что ...
  - электроны в молекуле принадлежат не отдельным атомам и не отдельной химической связи, а всей молекуле,
  - химическая связь между двумя атомами осуществляется с помощью одной или нескольких электронных пар.
3. Решение стационарного уравнения Шредингера для молекулы соответствует ...
  - решению уравнения Шредингера многоэлектронной системы для стационарной ядерной геометрии,
  - решению уравнения Шредингера с учетом движения ядер в молекуле.
4. Продолжите утверждение: Деформация электронного облака атомной орбитали водородоподобных атомов под действием заряда учитывается в наборе ...
  - 6-31G(d,p),
  - 6-311++G(3d).
5. Выберите, в какой набор введены диффузные функции для неводородных атомов.
  - 6-31G(d),
  - 3-21+G.
6. Продолжите утверждение: Современные квантовые методы *ab initio* включают ...
  - методы конфигурационного взаимодействия,
  - методы Теории Функционала Поля,
  - гибридные методы.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.1.3. Лабораторные занятия

Примерный перечень тем

1. Построение начальной геометрии структуры молекулы. Визуализация результатов расчётов в различных продуктах
  2. Расчет внутренней энергии в разных базисных наборах. Выбор оптимального базисного набора для расчета. Использование научных баз данных Scopus, WoS, РИНЦ для выбора метода расчета и базового набора
  3. Расчет возможных моделей протонирования молекул
  4. Расчет возможных возбужденных состояний на примере молекулы с флюорофором.
- Определение локализации МО возбуждённых и основных состояний

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2. Описание внеаудиторных контрольно-оценочных мероприятий и средств текущего контроля по дисциплине модуля

Разноуровневое (дифференцированное) обучение.

### Базовый

### 5.2.1. Контрольная работа

Примерный перечень тем

1. Волновая функция молекулы
2. Описание химической связи – МВС, ММО
3. Приближение Бора-Опенгеймера. Ограничения
4. Классификация методов расчета. Различия гибридных методов
5. Выбор базисного набора. Количество функций для различных базисных наборов

Примерные задания

1. Рассчитать вклад отдельных переходов на новый энергетический уровень в квантовый выход возбужденного состояния. Проанализировать результат.
2. Симулировать расчетный ЭПР-спектр аддукта спиновой ловушки ДМПО и гидроксильного радикала.
3. Представить рисунок электронной плотности Верхней Занятой Молекулярной Орбитали молекулы 4-амино-ТЕМПО.
4. Составить задание на оптимизацию для ДФПГ в программе ORCA.
5. Используя расчетные файлы, определить распределение спиновой плотности.
6. Используя расчетные данные для молекулы, определить энергию ионизации и сродства к электрону.
7. В общем виде расписать разложение молекулярной орбитали атома водорода в базисе STO-3G.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.2. Коллоквиум

Примерный перечень тем

1. Основные понятия и подходы квантовой механики. Волна де Бройля. Волновая функция
  2. Детерминант Слэйтера. Метод Хартри-Фока. Общие положения метода
  3. Современные квантовые методы: ab initio: конфигурационного взаимодействия, теории возмущений; полуэмпирические, функционала плотности ТФП. Гибридные функционалы
  4. Моделирование ЭПР и ЯМР спектров молекул в программах ORCA и Gaussian
- Примерные задания
1. Объясните основные понятия и подходы квантовой механики.
  2. Приведите уравнение Шредингера для молекулы. Раскрыть суть метода молекулярных орбиталей.
  3. Раскройте понятие «adiaбатическое приближение Бора-Оппенгеймера». Приведите границы применимости adiabatic approximation.
  4. Приведите решение стационарного ур-я Шредингера для молекулы. Детерминант Слэйтера. Метод Хартри-Фока. Общие положения метода.
  5. Приведите решение для систем с закрытыми и открытыми оболочками. Самосогласованное поле (ССП).
  6. Опишите базисные функции, привести стандартные базисные наборы гауссовских функций.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.3. Отчет по лабораторным работам № 1

Примерный перечень тем

1. Построение начальной геометрии структуры молекулы. Визуализация результатов расчётов в различных продуктах

Примерные задания

Ответить на вопросы к работе. Ознакомиться с интерфейсом программ, их основным функционалом. Пользуясь инструментами программы, определить возможность изменения геометрических параметров структуры, добавление фрагмента в структуру. Построить первоначальную структуру молекул в программах. Записать файл с данными декартовых координат.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.4. Отчет по лабораторным работам № 2

Примерный перечень тем

1. Расчет оптимизированной структуры на примере различных молекул (2-3 простые структуры). Анализ электронной плотности и распределения заряда

Примерные задания

Ответить на вопросы к работе. Создать входящие файлы программ с заданием для оптимизации молекул. Рассчитать модель оптимизации. На основании данных смоделированных структур охарактеризовать химические свойства молекул.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.5. Отчет по лабораторным работам № 3

Примерный перечень тем

1. Расчет внутренней энергии в разных базисных наборах. Выбор оптимального базисного набора для расчета. Использование научных баз данных Scopus, WoS, РИНЦ для выбора метода расчета и базового набора

Примерные задания

Ответить на вопросы к работе. Задать в ключевой строке файла задания на расчет – способ закрытых оболочек методом РВЕ0 в базисе def2-SVP. Провести расчет. По окончании выполнить расчеты в базисе def2-TZVP и def2-TZVPP. На основании рассчитанных выходных файлов составить таблицу в Excel методов, базисных наборов, длительности и результатов расчета.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.6. Отчет по лабораторным работам № 4

Примерный перечень тем

1. Определение локализации центров восстановления у различных молекул в том числе с учетом сольватации

Примерные задания

Используя данные оптимизированных структур из лабораторных работ № 2, 3, оптимизировать структуру восстановленной формы хиноксалина, рассчитать внутреннюю энергию и термодинамические параметры гибридным методом В3LYP в базисном наборе 6-311++G(d,p) в растворителе ДМСО. Используя данные оптимизированных структур из лабораторных работ № 2, 3, оптимизировать структуру восстановленной формы аниона

триазавирина, рассчитать внутреннюю энергию и термодинамические параметры гибридным методом PBE0 в базисном наборе def2-TZVP в растворителе ДМСО. На основании данных выходных файлов сделать вывод о вероятности восстановления молекул хиноксалина, триазавирина. Верифицировать результаты с экспериментальными данными электрохимического метода. Сделать выводы о возможных центрах восстановления молекул в ДМСО. Подтвердить экспериментальными данными научных статей.

LMS-платформа – не предусмотрена

### **5.2.7. Отчет по лабораторным работам № 5**

Примерный перечень тем

1. Расчет возможных моделей протонирования молекул

Примерные задания

Ответить на вопросы к работе. Используя данные оптимизированных структур молекул из лабораторных работ № 2, 3, 4 (рассчитанную внутреннюю энергию и термодинамические параметры молекул) гибридным методом, рассчитать карту электростатического потенциала (ESP) молекул основных форм. Предложить возможные центры протонирования. Рассчитать протонированные формы молекулы в различных центрах протонирования. Используя термодинамические параметры, определить вероятность протонирования в разных центрах.

LMS-платформа – не предусмотрена.

LMS-платформа – не предусмотрена

### **5.2.8. Отчет по лабораторным работам № 6**

Примерный перечень тем

1. Расчет ЭПР спектров. Симуляция ЭПР спектра в программе MATLAB с библиотекой EasySpin. Сравнение с экспериментальными спектрами

Примерные задания

Ответить на вопросы к работе. Оптимизировать в программе заданную структуру. Смоделировать у оптимизированной молекулы параметры ЭПР спектра. Симулировать расчетный спектр. Сравнить экспериментальный и расчетный спектры.

LMS-платформа – не предусмотрена

### **5.2.9. Отчет по лабораторным работам № 7**

Примерный перечень тем

1. Расчет возможных возбужденных состояний на примере молекулы с флюорофором. Определение локализации МО возбужденных и основных состояний

Примерные задания

Ответить на вопросы к работе. Оптимизировать структуру молекулы с флюорофором. Рассчитать энергии верхних МО орбиталей. Рассчитать возбужденные состояния молекулы. Сопоставить результат с возможной разницей в энергии уровней МО. Выбрать наиболее вероятный переход и рассчитать длину волны поглощения. Сравнить спектр с экспериментальным.

LMS-платформа – не предусмотрена

### **5.3. Описание контрольно-оценочных мероприятий промежуточного контроля по дисциплине модуля**

#### **5.3.1. Экзамен**

Список примерных вопросов

1. Адиабатическое приближение Бора-Оппенгеймера. Границы применимости адиабатического приближения
2. Классификация методов квантово-химического расчета
3. Описать различия в гибридных методах методов ТФП с учетом вклада всех энергий. Эффективность методов DFT
4. Метод Хартри-Фока. Решение для систем с закрытыми и открытыми оболочками. Самосогласованное поле (ССП).
5. Базисные функции. Стандартные базисные наборы гауссовских функций. Минимальный базисный набор.
6. Базисные наборы Попла, Даннинга, Карлсруэ. Валентно-расщепленные базисы. Базисы, содержащие поляризационные, диффузные функции. Выбор набора базисных функций для расчета.
7. Различные типы расчетов: оптимизированной геометрической конфигурация, колебательных частот и термодинамических параметров молекулы  
LMS-платформа – не предусмотрена

#### **5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности**

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.