

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ
проф. Таюрский Д.А.

"__" _____ 20__ г.

Программа дисциплины

Фундаментальные основы межмолекулярных взаимодействий Б1.В.ДВ.02.02

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Медицинская химия

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2019

Автор(ы): Штырлин В.Г.

Рецензент(ы): Балакин К.В.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Амиров Р. Р.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 20__ г.

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 20__ г.

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы
2. Место дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы высшего образования
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
 - 6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы и форм контроля их освоения
 - 6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания
 - 6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы
 - 6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
 - 7.1. Основная литература
 - 7.2. Дополнительная литература
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. (доцент) Штырлин В.Г. (Кафедра неорганической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Valery.Shtyrlin@kpfu.ru

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Выпускник, освоивший дисциплину, должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ современной химии и смежных наук при решении профессиональных задач
ПК-3	Способен анализировать новую научную проблематику, применять методы и средства планирования, организации и проведения научных исследований в выбранной области химии и смежных наук

Выпускник, освоивший дисциплину:

Должен знать:

- основные типы межмолекулярных взаимодействий;
- основные методы количественного описания межмолекулярных взаимодействий;
- особенности межмолекулярных взаимодействий в биологических системах и их значение для жизни.

Должен уметь:

- анализировать данные расчетов параметров межмолекулярных взаимодействий в различных агрегатных состояниях;
- ориентироваться в литературе, касающейся описания различных типов межмолекулярных взаимодействий.

Должен владеть:

- способами качественного описания межмолекулярных взаимодействий в жидких и твердых фазах;
- основами техники расчетов параметров межмолекулярных взаимодействий в различных агрегатных состояниях.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- применять современные подходы к описанию характеристик межмолекулярных взаимодействий в различных агрегатных состояниях;
- обсуждать особенности различных типов межмолекулярных взаимодействий в газовой фазе и конденсированном состоянии;
- анализировать данные расчетов параметров межмолекулярных взаимодействий в различных агрегатных состояниях;
- ориентироваться в литературе, касающейся описания различных типов межмолекулярных взаимодействий;
- рассчитывать параметры межмолекулярных взаимодействий в различных агрегатных состояниях.

2. Место дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы высшего образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ДВ.02.02 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Медицинская химия)" и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 2 курсе в 3 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) на 72 часа(ов).

Контактная работа - 22 часа(ов), в том числе лекции - 12 часа(ов), практические занятия - 10 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 50 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 3 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Тема 1. Введение в проблематику межмолекулярных взаимодействий и их классификация.	3	2	0	0	8
2.	Тема 2. Тема 2. Типы межмолекулярных взаимодействий: качественный аспект.	3	2	2	0	8
3.	Тема 3. Тема 3. Расчеты межмолекулярных взаимодействий.	3	2	2	0	8
4.	Тема 4. Тема 4. Неаддитивность межмолекулярных взаимодействий и изотропные модельные потенциалы.	3	2	2	0	8
5.	Тема 5. Тема 5. Модельные потенциалы в расчетах и описании межмолекулярных взаимодействий.	3	2	2	0	8
6.	Тема 6. Тема 6. Межмолекулярные взаимодействия в биологических системах.	3	2	2	0	10
	Итого		12	10	0	50

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Тема 1. Введение в проблематику межмолекулярных взаимодействий и их классификация.

Предмет межмолекулярных взаимодействий. Исторический обзор подходов к межмолекулярным взаимодействиям. Квантово-химические принципы межмолекулярных взаимодействий. Концепция межатомных потенциалов и адиабатическое приближение. Сопоставление экспериментальных и расчетных данных. Классификация межмолекулярных взаимодействий.

Тема 2. Тема 2. Типы межмолекулярных взаимодействий: качественный аспект.

Прямые электростатические взаимодействия. Резонансное взаимодействие. Поляризационное взаимодействие: индукционное и дисперсионное взаимодействия. Обменное взаимодействие. Эффекты запаздывания в дальнедействующих взаимодействиях. Релятивистские взаимодействия. Взаимодействия между макроскопическими телами.

Тема 3. Тема 3. Расчеты межмолекулярных взаимодействий.

Расчет межмолекулярных взаимодействий. Общее выражение для мультипольного разложения оператора кулоновского взаимодействия. Выражения для дисперсионных и индукционных взаимодействий. Сходимость и расходимость мультипольного разложения. Теория возмущения с учетом электронного обмена. Вариационные методы.

Тема 4. Тема 4. Неаддитивность межмолекулярных взаимодействий и изотропные модельные потенциалы.

Проблема неаддитивности межмолекулярных взаимодействий. Происхождение неаддитивности и проявление неаддитивных эффектов взаимодействия. Теория возмущений и многочастичное разложение. Многочастичные эффекты в атомных кластерах. Схема атом-атомных потенциалов и неаддитивность. Изотропные модельные потенциалы (начало).

Тема 5. Тема 5. Модельные потенциалы в расчетах и описании межмолекулярных взаимодействий.

Изотропные модельные потенциалы (продолжение). Полуэмпирические анизотропные модельные потенциалы. Модельные потенциалы, используемые для описания воды и водных систем. Методы оценки параметров модельных потенциалов. Вычисление параметров потенциалов на основе экспериментальных данных. Методы глобальной оптимизации.

Тема 6. Межмолекулярные взаимодействия в биологических системах.

Оценки межмолекулярных взаимодействий в водных растворах аминокислот, белков и нуклеотидов. Анализ механизмов ферментативных реакций с учетом межмолекулярных взаимодействий. Применение методов молекулярной динамики и гибридных методов квантовая механика/молекулярная механика для расчетов межмолекулярных взаимодействий в биологических системах.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301).

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений".

Положение от 29 декабря 2018 г. № 0.1.1.67-08/328 "О порядке проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет".

Положение № 0.1.1.67-06/241/15 от 14 декабря 2015 г. "О формировании фонда оценочных средств для проведения текущей, промежуточной и итоговой аттестации обучающихся федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет".

Положение № 0.1.1.56-06/54/11 от 26 октября 2011 г. "Об электронных образовательных ресурсах федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет".

Регламент № 0.1.1.67-06/66/16 от 30 марта 2016 г. "Разработки, регистрации, подготовки к использованию в учебном процессе и удаления электронных образовательных ресурсов в системе электронного обучения федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет".

Регламент № 0.1.1.67-06/11/16 от 25 января 2016 г. "О балльно-рейтинговой системе оценки знаний обучающихся в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет".

Регламент № 0.1.1.67-06/91/13 от 21 июня 2013 г. "О порядке разработки и выпуска учебных изданий в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет".

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

6.1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы и форм контроля их освоения

Этап	Форма контроля	Оцениваемые компетенции	Темы (разделы) дисциплины
Семестр 3			
	<i>Текущий контроль</i>		

Этап	Форма контроля	Оцениваемые компетенции	Темы (разделы) дисциплины
1	Устный опрос	ПК-3 , ПК-1	1. Тема 1. Введение в проблематику межмолекулярных взаимодействий и их классификация. 2. Тема 2. Типы межмолекулярных взаимодействий: качественный аспект. 3. Тема 3. Расчеты межмолекулярных взаимодействий. 4. Тема 4. Неаддитивность межмолекулярных взаимодействий и изотропные модельные потенциалы. 5. Тема 5. Модельные потенциалы в расчетах и описании межмолекулярных взаимодействий. 6. Тема 6. Межмолекулярные взаимодействия в биологических системах.
2	Контрольная работа	ПК-1 , ПК-3	1. Тема 1. Введение в проблематику межмолекулярных взаимодействий и их классификация. 2. Тема 2. Типы межмолекулярных взаимодействий: качественный аспект. 3. Тема 3. Расчеты межмолекулярных взаимодействий. 4. Тема 4. Неаддитивность межмолекулярных взаимодействий и изотропные модельные потенциалы. 5. Тема 5. Модельные потенциалы в расчетах и описании межмолекулярных взаимодействий. 6. Тема 6. Межмолекулярные взаимодействия в биологических системах.
	Зачет	ПК-1, ПК-3	

6.2 Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Форма контроля	Критерии оценивания				Этап
	Отлично	Хорошо	Удовл.	Неуд.	
Семестр 3					
Текущий контроль					
Устный опрос	В ответе качественно раскрыто содержание темы. Ответ хорошо структурирован. Прекрасно освоен понятийный аппарат. Продemonстрирован высокий уровень понимания материала. Превосходное умение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения.	Основные вопросы темы раскрыты. Структура ответа в целом адекватна теме. Хорошо освоен понятийный аппарат. Продemonстрирован хороший уровень понимания материала. Хорошее умение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения.	Тема частично раскрыта. Ответ слабо структурирован. Понятийный аппарат освоен частично. Понимание отдельных положений из материала по теме. Удовлетворительное умение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения.	Тема не раскрыта. Понятийный аппарат освоен неудовлетворительно. Понимание материала фрагментарное или отсутствует. Неумение формулировать свои мысли, обсуждать дискуссионные положения.	1
Контрольная работа	Правильно выполнены все задания. Продemonстрирован высокий уровень владения материалом. Проявлены превосходные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Правильно выполнена большая часть заданий. Присутствуют незначительные ошибки. Продemonстрирован хороший уровень владения материалом. Проявлены средние способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Задания выполнены более чем наполовину. Присутствуют серьезные ошибки. Продemonстрирован удовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены низкие способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Задания выполнены менее чем наполовину. Продemonстрирован неудовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены недостаточные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	2
	Зачтено		Не зачтено		

Форма контроля	Критерии оценивания				Этап
	Отлично	Хорошо	Удовл.	Неуд.	
Зачет	Обучающийся обнаружил знание основного учебно-программного материала в объеме, необходимом для дальнейшей учебы и предстоящей работы по специальности, справился с выполнением заданий, предусмотренных программой дисциплины.		Обучающийся обнаружил значительные пробелы в знаниях основного учебно-программного материала, допустил принципиальные ошибки в выполнении предусмотренных программой заданий и не способен продолжить обучение или приступить по окончании университета к профессиональной деятельности без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.		

6.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Семестр 3

Текущий контроль

1. Устный опрос

Темы 1, 2, 3, 4, 5, 6

Тема 1. Введение в проблематику межмолекулярных взаимодействий и их классификация.

примерные вопросы:

Источники информации о межмолекулярных взаимодействиях. Значение модельных потенциалов и их ограничения. История развития представлений о природе межмолекулярных сил. Ориентационные и индукционные силы, обменное взаимодействие и дисперсионные силы. Адиабатическое приближение, вибронное взаимодействие, эффект Яна-Теллера. Концепция межатомных потенциалов. Проблема неаддитивности. Диабатическое представление. Общая классификация межмолекулярных взаимодействий: область I - кулоновское и обменное взаимодействие; область II - прямое электростатическое, обменное, обменно-поляризационное взаимодействия и перенос заряда; область III - мультипольное электростатическое взаимодействие, поляризационное (индукционное и дисперсионное) взаимодействие, релятивистское (магнитное) взаимодействие, взаимодействие с запаздыванием.

Тема 2. Типы межмолекулярных взаимодействий: качественный аспект.

примерные вопросы:

Прямые электростатические взаимодействия. Мультипольные моменты и их зависимость от симметрии молекул. Мультиполь-мультипольное взаимодействие. Резонансное взаимодействие. Поляризационное взаимодействие. Индукционное взаимодействие. Дисперсионное взаимодействие. Обменное взаимодействие. Эффекты запаздывания. Релятивистские взаимодействия. Взаимодействие между макроскопическими телами (силы Казимира).

Тема 3. Расчеты межмолекулярных взаимодействий.

примерные вопросы:

Большие расстояния: мультипольное разложение оператора кулоновского взаимодействия; энергия взаимодействия двух атомов в S-состояниях; дисперсионные и индукционные взаимодействия; проблема сходимости мультипольного разложения. Промежуточные и малые расстояния: теория возмущений с учетом электронного обмена; вариационные методы; теория функционала плотности.

Тема 4. Неаддитивность межмолекулярных взаимодействий и изотропные модельные потенциалы.

примерные вопросы:

Многочастичные силы. Проявление неаддитивных эффектов. Теория возмущений и многочастичное разложение. Аддитивность дисперсионной энергии во втором порядке теории возмущений. Значения дисперсионной энергии в высших порядках теории возмущений. Многочастичные эффекты в атомных кластерах. Схема атом-атомных потенциалов и неаддитивность. Изотропные полуэмпирические модельные потенциалы: потенциал жестких сфер; потенциал Леннард-Джонса; модификации потенциала Леннард-Джонса; потенциал Бакингема; модификации потенциала Бакингема; потенциал Морзе; потенциал Ридберга; потенциал Пёшля-Теллера; потенциал Кратцера; потенциал Данхэма и его модификации.

Тема 5. Модельные потенциалы в расчетах и описании межмолекулярных взаимодействий.

примерные вопросы:

Анизотропные модельные потенциалы - потенциал Кеезома, потенциал Штокмаера, потенциалы взаимодействия атом-линейная молекула, потенциалы, используемые для описания воды и водных растворов; экранированный кулоновский потенциал; потенциал Борна-Майера; потенциал Бойса-Шавитта; кусочногладкие потенциалы; модельные потенциалы, параметризованные по результатам неэмпирических расчетов потенциальных поверхностей. Определение параметров модельных потенциалов. Реконструкция потенциалов на основе экспериментальных данных. Методы глобальной оптимизации: симулированный отжиг, методы деформации гиперповерхности, генетический алгоритм.

Тема 6. Межмолекулярные взаимодействия в биологических системах.

примерные вопросы:

Примеры описания межмолекулярных взаимодействий в водных растворах аминокислот, белков и нуклеотидов. Учет межмолекулярных взаимодействий при описании механизмов ферментативных реакций. Методы молекулярной динамики и гибридные методы квантовая механика/молекулярная механика для расчетов межмолекулярных взаимодействий в биологических системах. Значение водородной связи в биологических системах. Супрамолекулярные структуры в биологических системах.

2. Контрольная работа

Темы 1, 2, 3, 4, 5, 6

Вопросы к контрольной работе:

1. Адиабатическое приближение, вибронное взаимодействие, эффект Яна-Теллера.
2. Концепция межатомных потенциалов и проблема неаддитивности. Диабатическое представление.
3. Прямые электростатические взаимодействия.
4. Мультипольные моменты и их зависимость от симметрии молекул. Мультиполь-мультипольное взаимодействие.
5. Резонансное взаимодействие.
6. Поляризационное взаимодействие.
7. Индукционное взаимодействие.
8. Дисперсионное взаимодействие.
9. Обменное взаимодействие.
10. Эффекты запаздывания.
11. Релятивистские (магнитные) взаимодействия.
12. Взаимодействие между макроскопическими телами (силы Казимира).
13. Мультипольное разложение оператора кулоновского взаимодействия.
14. Энергия взаимодействия двух атомов в S-состояниях
15. Сходимость мультипольного разложения.
16. Теория возмущений с учетом электронного обмена.
17. Вариационные методы.
18. Теория функционала плотности.
19. Многочастичные силы. Проявление неаддитивных эффектов.
20. Теория возмущений и многочастичное разложение.
21. Многочастичные эффекты в атомных кластерах.
22. Схема атом-атомных потенциалов и неаддитивность.
23. Изотропные полуэмпирические модельные потенциалы: потенциал жестких сфер; потенциал Леннард-Джонса; модификации потенциала Леннард-Джонса.
24. Изотропные полуэмпирические модельные потенциалы: потенциал Бакингема; модификации потенциала Бакингема
25. Изотропные полуэмпирические модельные потенциалы: потенциал Морзе; потенциал Ридберга; потенциал Пёшля-Теллера.
26. Изотропные полуэмпирические модельные потенциалы: потенциал Кратцера; потенциал Данхэма и его модификации.
27. Анизотропные модельные потенциалы: потенциал Кеезома, потенциал Штокмаера.
28. Анизотропные модельные потенциалы: потенциалы взаимодействия атом-линейная молекула, потенциалы, используемые для описания воды и водных растворов.
29. Экранированный кулоновский потенциал; потенциал Борна-Майера; потенциал Бойса-Шавитта.
30. Комбинированные (кусочногладкие) потенциалы.
31. Модельные потенциалы, параметризованные по результатам неэмпирических расчетов потенциальных поверхностей.
32. Определение параметров модельных потенциалов.
33. Реконструкция потенциалов на основе экспериментальных данных.
34. Методы глобальной оптимизации: симулированный отжиг.
35. Методы глобальной оптимизации: методы деформации гиперповерхности.
36. Методы глобальной оптимизации: генетический алгоритм.
37. Описание межмолекулярных взаимодействий в водных растворах аминокислот.
38. Описание межмолекулярных взаимодействий в водных растворах белков.
39. Описание межмолекулярных взаимодействий в водных растворах нуклеотидов.
40. Учет межмолекулярных взаимодействий при описании механизмов ферментативных реакций.
41. Методы молекулярной динамики и гибридные методы квантовая механика/молекулярная механика для расчетов межмолекулярных взаимодействий в биологических системах.
42. Природа и значение водородной связи в биологических системах.
43. Супрамолекулярные структуры в биологических системах.

Зачет

Вопросы к зачету:

Билет ♦ 1

1. Адиабатическое приближение.
2. Мультипольное разложение оператора кулоновского взаимодействия.
3. Анизотропные модельные потенциалы: потенциалы взаимодействия атом-линейная молекула; потенциалы, используемые для описания воды и водных растворов.

Билет ♦ 2

1. Вибронное взаимодействие, эффект Яна-Теллера.
2. Энергия взаимодействия двух атомов в S-состояниях.
3. Экранированный кулоновский потенциал, потенциал Борна-Майера, потенциал Бойса-Шавитта.

Билет ♦ 3

1. Концепция межатомных потенциалов и проблема неаддитивности.
2. Сходимость мультипольного разложения.
3. Комбинированные (кусочногладкие) потенциалы.

Билет ♦ 4

1. Адиабатическое представление.
2. Теория возмущений с учетом электронного обмена.
3. Модельные потенциалы, параметризованные по результатам неэмпирических расчетов потенциальных поверхностей.

Билет ♦ 5

1. Прямые электростатические взаимодействия.
2. Вариационные методы.
3. Определение параметров модельных потенциалов.

Билет ♦ 6

1. Мультипольные моменты и их зависимость от симметрии молекул.
2. Основы теории функционала плотности.
3. Реконструкция потенциалов на основе экспериментальных данных.

Билет ♦ 7

1. Резонансное взаимодействие.
2. Многочастичные силы. Проявление неаддитивных эффектов.
3. Методы глобальной оптимизации: симулированный отжиг.

Билет ♦ 8

1. Поляризационное взаимодействие.
2. Теория возмущений и многочастичное разложение.
3. Методы глобальной оптимизации: методы деформации гиперповерхности.

Билет ♦ 9

1. Индукционное взаимодействие.
2. Многочастичные эффекты в атомных кластерах.
3. Методы глобальной оптимизации: генетический алгоритм.

Билет ♦ 10

1. Дисперсионное взаимодействие.
2. Схема атом-атомных потенциалов и неаддитивность.
3. Описание межмолекулярных взаимодействий в водных растворах аминокислот.

Билет ♦ 11

1. Обменное взаимодействие.
2. Потенциал жестких сфер, потенциал Леннарда-Джонса, модификации потенциала Леннарда-Джонса.
3. Описание межмолекулярных взаимодействий в водных растворах белков.

Билет ♦ 12

1. Эффекты запаздывания в межмолекулярных взаимодействиях.
2. Потенциал Бакингема, модификации потенциала Бакингема.
3. Описание межмолекулярных взаимодействий в водных растворах нуклеотидов.

Билет ♦ 13

1. Релятивистские (магнитные) взаимодействия.
2. Потенциал Морзе, потенциал Ридберга, потенциал Пёшля-Теллера.
3. Межмолекулярные взаимодействия в описании механизмов ферментативных реакций.

Билет ♦ 14

1. Взаимодействие между макроскопическими телами (силы Казимира).
2. Потенциал Кратцера, потенциал Данхэма и его модификации.
3. Методы МД и гибридные методы КМ/ММ для расчетов межмолекулярных взаимодействий в биологических системах.

Билет ♦ 15

1. Мультиполь-мультипольное взаимодействие.
2. Потенциал Кeesома, потенциал Штокмаера.
3. Природа и значение водородной связи в биологических системах.

6.4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

В КФУ действует балльно-рейтинговая система оценки знаний обучающихся. Суммарно по дисциплине (модулю) можно получить максимум 100 баллов за семестр, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов.

Для зачёта:

56 баллов и более - "зачтено".

55 баллов и менее - "не зачтено".

Для экзамена:

86 баллов и более - "отлично".

71-85 баллов - "хорошо".

56-70 баллов - "удовлетворительно".

55 баллов и менее - "неудовлетворительно".

Форма контроля	Процедура оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	Этап	Количество баллов
Семестр 3			
Текущий контроль			
Устный опрос	Устный опрос проводится на практических занятиях. Обучающиеся выступают с докладами, сообщениями, дополнениями, участвуют в дискуссии, отвечают на вопросы преподавателя. Оценивается уровень домашней подготовки по теме, способность системно и логично излагать материал, анализировать, формулировать собственную позицию, отвечать на дополнительные вопросы.	1	25
Контрольная работа	Контрольная работа проводится в часы аудиторной работы. Обучающиеся получают задания для проверки усвоения пройденного материала. Работа выполняется в письменном виде и сдаётся преподавателю. Оцениваются владение материалом по теме работы, аналитические способности, владение методами, умения и навыки, необходимые для выполнения заданий.	2	25
Зачет	Зачёт нацелен на комплексную проверку освоения дисциплины. Обучающийся получает вопрос (вопросы) либо задание (задания) и время на подготовку. Зачёт проводится в устной, письменной или компьютерной форме. Оценивается владение материалом, его системное освоение, способность применять нужные знания, навыки и умения при анализе проблемных ситуаций и решении практических заданий.		50

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

7.1 Основная литература:

1. Каплан И.Г., Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] : учебное пособие / Каплан И.Г. ; под ред. Н. Ф. Степанова ; пер.с англ. Д. С. Безрукова, И. Г. Рябинкина.. - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 397 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94111>
2. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.Г. Цирельсон. - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 522 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>

7.2. Дополнительная литература:

1. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учебное пособие / Майер И. ; под ред. А. Л. Чугреева ; пер. с англ. М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 387 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94102>
2. Кочелаев, Борис Иванович Квантовая теория : конспект лекций / Б. И. Кочелаев ; Казан. федер. ун-т, Ин-т физики, Каф теорет. физики. - [2-е изд., перераб., доп. и испр.] .- Казань : [Казанский университет], 2013. - 222 с.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

межмолекулярные взаимодействия - <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/2477.html>

поисковая система - <http://www.google.ru>

химическая связь - http://ru.wikiversity.org/wiki/Химическая_связь

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	<p>Изучение дисциплины следует начинать с проработки рабочей программы, особое внимание, уделяя целям и задачам, структуре и содержанию курса.</p> <p>Работа с конспектом лекций:</p> <p>Необходимо просматривать конспект сразу после занятий, отметьте материал конспекта лекций, который вызывает затруднения для понимания. Попытайтесь найти ответы на затруднительные вопросы, используя рекомендуемую литературу. Если самостоятельно не удалось разобраться в материале, сформулируйте вопросы и обратитесь за помощью к преподавателю на консультации или ближайшей лекции. Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам. Попытайтесь найти ответы на затруднительные вопросы, используя рекомендуемую литературу. Если самостоятельно не удалось разобраться в материале, сформулируйте вопросы и обратитесь за помощью к преподавателю на консультации или ближайшей лекции. Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам.</p>
практические занятия	<p>Во время практических работ необходимо постоянно углублять свои представления об основных понятиях, концепциях, принципах и законах природы, которые были предметом рассмотрения на соответствующих лекционных занятиях. Перед началом каждого практического занятия полезно еще раз просмотреть рабочую программу и спросить себя, в какой мере Вы уже сумели достичь сформулированных в ней целей и решить поставленные задачи курса. Если ответ на этот вопрос Вас не удовлетворит, повторите, пожалуйста, пройденный материал по конспектам лекций и их презентациям. Если же этого окажется недостаточным, обратитесь к рекомендованной литературе, а при необходимости сформулируйте проблемные вопросы и попросите помощи преподавателя на консультации или ближайшей лекции.</p>
самостоятельная работа	<p>Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студентов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:</p> <ul style="list-style-type: none">- чтение рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;- подготовку к практическим занятиям, лабораторным работам и курсовой работе;- работу с Интернет-источниками;- подготовку к сдаче практических работ, выполнению тестовых заданий и сдаче зачетов и экзаменов. <p>Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.</p>
устный опрос	<p>При самостоятельной работе по подготовке к устному опросу необходимо ознакомиться с темой и списком вопросов по теме. Повторите лекционный материал по теме, отметьте "проблемные" точки. Определите необходимую литературу из рекомендованной к курсу, можно воспользоваться интернет-источниками. При работе с источниками, учебниками и методическими пособиями, выполняйте общие рекомендации по самостоятельной работе. Сформируйте тезисный список ответов на вопросы, со своими замечаниями и комментариями. Студент должен быть готов ответить на поставленные вопросы, аргументировать свой вариант ответа, ответить на дополнительные и уточняющие вопросы преподавателя. После окончания опроса оценить степень правильности своих ответов, уяснить суть замечаний и комментариев преподавателя.</p>

Вид работ	Методические рекомендации
контрольная работа	<p>Контрольная работа является одной из составляющих учебной деятельности студента по овладению знаниями. К ее выполнению необходимо приступить только после изучения тем дисциплины.</p> <p>Целью контрольной работы является определения качества усвоения лекционного материала и части дисциплины, предназначенной для самостоятельного изучения.</p> <p>Задачи, стоящие перед студентом при подготовке и написании контрольной работы:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. закрепление полученных ранее теоретических знаний; 2. выработка навыков самостоятельной работы; 3. выяснение подготовленности студента к будущей практической работе. <p>Контрольные выполняются студентами в аудитории под наблюдением преподавателя. Тема контрольной работы известна и проводится она по сравнительно недавно изученному материалу.</p> <p>Преподаватель готовит задания либо по вариантам, либо индивидуально для каждого студента. По содержанию работа может включать теоретический материал, задачи, тесты, расчеты и т.п. выполнению контрольной работы предшествует инструктаж преподавателя.</p> <p>Ключевым требованием при подготовке к контрольной работе выступает творческий подход, умение обрабатывать и анализировать информацию, делать самостоятельные выводы, обосновывать целесообразность и эффективность предлагаемых рекомендаций и решений проблем, четко и логично излагать свои мысли. Подготовку к контрольной работе следует начинать с повторения соответствующего раздела учебника, учебных пособий по данной теме и конспектов лекций.</p>
зачет	<p>На зачете определяется качество и объем усвоенных студентами знаний, способность к обобщению, анализу, восприятию информации, постановки цели и выбору путей ее достижения, а также умение работать с нормативными документами в рамках дисциплины. Он может проводиться в устной или письменной формах. Форму проведения определяет кафедра.</p> <p>Подготовка к зачету - процесс индивидуальный. Тем не менее, существуют некоторые правила, знание которых может быть полезным для всех. Залогом успешной сдачи зачета является систематическая работа над учебной дисциплиной в течение семестра. Подготовку желательно вести, исходя из требований программы учебной дисциплины. Целесообразно поэтапное освоение материала, выполнение различных заданий по мере изучения соответствующих содержательных разделов дисциплины. Если, готовясь к зачету, вы испытываете затруднения, обращайтесь за советом к преподавателю, тем более что при систематической подготовке у вас есть такая возможность. Готовясь к зачету, лучше всего сочетать повторение теоретических вопросов с выполнением практических заданий. Требования к знаниям студентов определены федеральным государственным образовательным стандартом и рабочей программой дисциплины. Цель зачета - проверка и оценка уровня полученных студентом специальных познаний по учебной дисциплине и соответствующих им умений и навыков, а также умения логически мыслить, аргументировать избранную научную позицию, реагировать на дополнительные вопросы, ориентироваться в массиве информации, дефиниций и категорий.</p> <p>Оценке подлежат правильность и грамотность речи студента, если зачет проводится в устной форме, а также его достижения в течение семестра. Дополнительной целью зачета является формирование у студентов таких качеств, как организованность, ответственность, трудолюбие, самостоятельность. Таким образом, проверяется сложившаяся у студента система знаний по дисциплине, что играет большую роль в подготовке будущего специалиста, способствует получению им фундаментальной и профессиональной подготовки. При подготовке к зачету важно правильно и рационально распланировать свое время, чтобы успеть на качественно высоком уровне подготовиться к ответам по всем вопросам. Во время подготовки к зачету студенты также систематизируют знания, которые они приобрели при изучении основных тем курса в течение семестра. Это позволяет им уяснить логическую структуру дисциплины, объединить отдельные темы в единую систему, увидеть перспективы ее развития.</p> <p>Самостоятельная работа по подготовке к зачету во время сессии должна планироваться студентом, исходя из общего объема вопросов, вынесенных на зачет, так, чтобы за предоставленный для подготовки срок он смог равномерно распределить приблизительно равное количество вопросов для ежедневного изучения. Важно, чтобы один последний день (либо часть его) был выделен для дополнительного повторения всего объема вопросов в целом. Это позволяет студенту самостоятельно перепроверить усвоение материала.</p>

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Освоение дисциплины "Фундаментальные основы межмолекулярных взаимодействий" предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Освоение дисциплины "Фундаментальные основы межмолекулярных взаимодействий" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи;
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе Медицинская химия.