



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра фундаментальной и прикладной химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель ОП

Л.Б. Кочетова Л.Б. Кочетова
(подпись)

« 1 » сентября 20 21 г.

Рабочая программа дисциплины

Компьютерное моделирование строения и свойств
биологически активных веществ

Уровень высшего образования:	бакалавриат
Квалификация выпускника:	бакалавр
Направление подготовки:	04.03.01 Химия
Направленность (профиль) образовательной программы:	Медицинская и фармацевтическая химия

Иваново



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

1. Цели освоения дисциплины

Целями дисциплины «Компьютерное моделирование строения и свойств биологически активных веществ» являются:

- формирование представлений о методах компьютерного моделирования, о возможностях и ограничениях разных методов квантово-химических расчетов;
- формирование основ для понимания геометрического и электронного строения веществ, в том числе лекарственных и биологически активных, и способов определения их реакционной способности;
- приобретение знаний, умений и навыков для определения и исследования свойств молекулярных систем, исследования рядов молекул и сопоставление свойств в рядах, постановку компьютерных экспериментов исследования новых лекарственных и биологически активных веществ с использованием теоретических представлений, научно-исследовательской деятельности, связанной с изучением химических явлений и процессов, при разработке и исследовании лекарственных средств методами компьютерного моделирования, научной и педагогической деятельности.

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина " Компьютерное моделирование строения и свойств биологически активных веществ " относится к обязательной части образовательной программы.

Студент, приступающий к изучению дисциплины, должен обладать знаниями, умениями и навыками, приобретенными в ходе изучения дисциплин: "Математика", "Физика", "Общая и неорганическая химия", "Квантовая механика и квантовая химия".

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

знать:

- основные законы естественнонаучных дисциплин: математики (алгебра, геометрия, математический анализ, высшая математика), физики (классическая и волновая механика, атомная физика), общей химии, квантовой механики и квантовой химии.

уметь:

- работать с компьютером на уровне пользователя;
- решать математические задачи;
- применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов.

иметь:

- первичные навыки решения математических и прикладных задач квантовой химии, первичными навыками анализа результатов квантово-химических расчетов.

Успешное освоение данной дисциплины будет способствовать готовности студентов к изучению следующих дисциплин: «Органическая химия», «Высокомолекулярные соединения».

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1. Компетенции, формированию которых способствует дисциплина

При освоении дисциплины формируются следующие компетенции в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

а) общепрофессиональные (ОПК):

ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

ОПК-5 Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности.

3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с формируемыми компетенциями

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- основы теории геометрического и электронного строения молекул и теоретические методы оценки реакционной способности возможности имеющихся программ для квантово-химических расчетов (ОПК-3, ОПК-5),
- методики расчетов различных свойств молекулярных систем (ОПК-3),

Уметь:

- работать с компьютером на уровне пользователя и применять законы квантовой механики и теории геометрического и электронного строения молекул для оценки реакционной способности соединений (ОПК-5),
- выполнять квантово-химические расчеты для определения геометрического строения молекул, моделирования координаты химической реакции, электронных и колебательных спектров, а также для оценки термодинамических свойств соединений и выполнять анализ результатов расчетов (ОПК-5),
- применять основные законы химии при обсуждении полученных математических расчетов и компьютерного моделирования (ОПК-5),
- составлять отчеты и делать выводы и обобщения (ОПК-3, ОПК-5).

Иметь:

- практический опыт применения методов квантово-химических расчетов при решении профессиональных задач и обсуждении полученных результатов (ОПК-3),
- навыки работы с программой для квантово-химических расчетов и навыки определения и исследования разнообразных свойств молекулярных систем (ОПК-5).

4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 5 зачетных единицы, 180 часов.

4.1. Содержание дисциплины по разделам (темам), соотнесенное с видами и трудоемкостью занятий лекционно-семинарского типа

Объем иной контактной работы и самостоятельной работы обучающегося по дисциплине указан в учебном плане образовательной программы.

№ п/п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем		Формы текущего контроля успеваемости Формы промежуточной аттестации
			Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	
1	Две основных группы методов компьютерной химии. Методы молекулярной механики. Методы квантовой механики	5	4	2	Отчет по лабораторной работе
2	Геометрическое строение молекул. Теория отталкивания валентных электронных пар.	5	10	4	Отчет по лабораторной работе Коллоквиум



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

	Сtereoхимия соединений непереходных элементов. Симметрия молекулярных систем. Структурно нежесткие молекулы.				
3	Качественные методы определения пространственного и электронного строения малых многоатомных молекул.	5	10	4	Отчет по лабораторной работе
4	Молекулы органических соединений. Теория гибридизации. Локализованные и делокализованные МО. Свойства π -сопряженных систем.	5	10	6	Отчет по лабораторной работе Коллоквиум
5	Теории реакционной способности органических соединений.	5	10	6	Отчет по лабораторной работе
6	Строение молекул биологически активных веществ. Молекулярные дескрипторы, их классификация: электронные, стерические и межмолекулярные. Прогноз о биологической активности вещества на основе молекулярных дескрипторов.	5	8	4	Отчет по лабораторной работе
7	Некоторые примеры задач, решаемых с помощью компьютерной химии: моделирование сложных полимерных молекул из отдельных звеньев. Методика построения полимеров. Конформационный анализ. Определение конформационных свойств молекул и геометрического строения конформеров.	5	8	4	Отчет по лабораторной работе Коллоквиум
8	Строение ди- и полисахаридов. Моно- и гетерополисахариды. Производные полисахаридов.	5	4	2	Отчет по лабораторной работе
9	Строение высокомолекулярных природных полимеров. Белки. Уровни организации белковых молекул.	5	4	2	Отчет по лабораторной работе Коллоквиум
	Итого за семестр:		68	32	Экзамен

4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

№	Основное содержание лекций
1	Две основных группы методов компьютерной химии. Методы молекулярной механики. Методы квантовой механики. Расчет геометрического строения молекул методом молекулярной механики. Силовые поля молекул. Стерическая энергия. Основные и второстепенные взаимодействия. Реализация метода молекулярной механики в программе HYPERCHEM.
2	<p>Геометрическое строение молекул. Параметры, определяющие геометрическую конфигурацию. Межъядерные расстояния, валентные углы, торсионные, диэдрические углы. Теория отталкивания валентных электронных пар. Стереохимия соединений непереходных элементов. Основные положения теории. Предсказание геометрической конфигурации молекул, имеющих один центральный атом (примеры молекул AX_2E, AX_2E_2, AX_5, AX_3E_2, AX_6, AX_3), молекул органических соединений. Достоинства и недостатки теории ОЭПВО.</p> <p>Симметрия молекулярных систем. Операции и элементы симметрии молекул. Оси и плоскости симметрии, центр симметрии.</p> <p>Точечные группы симметрии молекул. Типы точечных групп. Таблицы характеров. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение (дипольный момент, моменты инерции, формы нормальных колебаний и т.п.)</p> <p>Структурно нежесткие молекулы. Развитие представлений о геометрической конфигурации молекул. Жесткие молекулы. Малые колебания ядер вблизи положения равновесия. Нежесткие молекулы. Колебания с большими амплитудами. Потенциальные поверхности нежестких молекул. Миграция катиона вокруг аниона в солях. Деформационная нежесткость простых молекул MX_n. Псевдовращение в молекулах MX_5. Инверсия в молекулах MX_3. Поворотная изомерия и внутреннее вращение в молекулах насыщенных углеводородов. Потенциальная функция и барьер внутреннего вращения.</p>
3	<p>Качественные методы определения пространственного и электронного строения малых многоатомных молекул. Применение метода МО к многоатомным молекулам. Представление о симметрии молекулы, групповых орбиталях, таблице характеров (на примере молекулы BeH_2). Составление молекулярных орбиталей, построение диаграммы МО и определение свойств молекул H_2O, CO_2, CH_2O.</p> <p>Молекулы органических соединений. Насыщенные углеводороды. Теория гибридизации. sp^3-гибридизация АО углерода. Локализованные МО. Образование σ-связей. Свойства молекул.</p> <p>Молекулы с локализованными π-связями. Молекулы этилена и ацетилена. Диаграмма МО. Свойства молекулы.</p>
4	<p>π-электронное приближение. Схемы решения квантово-химических задач. Вековое уравнение и вековой определитель. Кулоновский, обменный интегралы, интеграл перекрывания.</p> <p>Свойства π-сопряженных систем. π-электронное приближение. Метод МО в приближении Хюккеля. Молекула бутадиена. Вековой определитель. Энергия π-МО. Волновые функции. Энергия делокализованных π-электронов. Энергия делокализации. Сравнение окислительных и восстановительных свойств в ряду молекул C_2H_4-$C_{10}H_{12}$ с сопряженными π-связями. Объяснение зависимости цвета красителей, содержащих цепь $(-CH=CH-)_n$, от количества атомов углерода в цепи. Расчет порядков π-связей и индексов свободной валентности. Определение направления реакции галогенирования полиенов C_nH_{n+2} с сопряженными π-связями.</p>



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

	Ароматические соединения. Бензол. Вековой определитель. Волновые функции. Энергия π -электронов. Доказательство делокализации π -электронов. Расчет порядков π -связей, индексов свободной валентности и зарядов на атомах. Правило Хюккеля. Бензол, нафталин, антрацен. Молекулы циклоенов C_4H_4 - C_8H_8 . Вековые определители. Энергия π -электронов. Энергия изгиба σ -связей. Устойчивость ионов $C_5H_5^-$ и $C_7H_7^+$.
5	Теории реакционной способности органических соединений. Теория изолированной молекулы. Индексы реакционной способности: порядки π -связей, индексы свободной валентности и заряды на атомах, самополяризуемость, анализ ВЗМО и НСМО, ПИ, СЭ и энергия возбуждения. Метод граничных орбиталей. Симметрия МО, вид граничных МО и определение направления химического взаимодействия. Реакция циклоприсоединения. Правила Вудворда-Гоффмана. Граничные орбитали для димеризации этилена. Влияние заместителей. Уравнение Гамета. Взаимодействие CH_2 - и CH_2^+ -групп с этиленом. Изменение энергий граничных МО при введении заместителей. Предсказание скоростей химических реакций. Энергия локализации и активированный комплекс в реакции нуклеофильного и электрофильного замещения в бензоле и бутadiене. Типы локализации. Энергия катионной, анионной и радикальной локализации в различных молекулах с делокализованным π -электронным облаком. Связь энергии локализации и скорости химической реакции. Определение места атаки в реакциях замещения.
6	Строение молекул биологически активных веществ; витамина С, триамингидрохлорида – витамина В ₁ , рибофлавина – витамина В ₂ , аспирина, ампициллина, кофеина, ментола, глюкозы. Молекулярные дескрипторы, их классификация: электронные, стерические и межмолекулярные. Прогноз о биологической активности вещества на основе молекулярных дескрипторов. Водородная связь и ее характеристики. Сильная, нормальная и слабая водородная связь. Внутримолекулярные и межмолекулярные водородные связи
7	Некоторые примеры задач, решаемых с помощью компьютерной химии: а) моделирования сложных полимерных молекул из отдельных звеньев. Методика построения полимеров. б) Конформационный анализ. Определение конформационных свойств молекул и геометрического строения конформеров.
8	Моделирование геометрического строения ди- и полисахаридов методами молекулярной механики. Моно- и гетерополисахариды. Производные полисахаридов.
9	Строение высокомолекулярных природных полимеров. Белки. Уровни организации белковых молекул. α -Спираль, «складчатый лист» и « β -петля». Типы связей между радикалами аминокислотных остатков в белковой молекуле.

5. Образовательные технологии

При реализации дисциплины «Компьютерное моделирование строения и свойств биологически активных веществ» используются:

- групповая работа.
- рейтинговая технология;
- технология развития критического мышления;

Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине:

- технологии смешанного обучения;
- технология компьютерного тестирования.



6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

При самостоятельной работе (СРС) обучающимся предлагается использовать материалы лекций, литературу из доступных электронно-библиотечных систем и различных электронных ресурсов. Текущая и опережающая СРС, направленная на углубление и закрепление знаний, а также развитие практических умений заключается в:

- работе обучающихся с лекционным материалом, поиск и анализ литературы и электронных источников информации по заданной проблеме;
- подготовке отчетов к лабораторным работам в соответствии с требованиями,
- подготовке к коллоквиумам и текущему и итоговому контролю;
- подготовке к экзамену.

Методический материал по обеспечению самостоятельной работы студентов приводится в приложении 1 к РП.

7. Характеристика оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

В качестве оценочных средств для проведения текущего контроля выступают: Требования к представлению отчетов по практическим работам. Вопросы к коллоквиумам. Вопросы и практические задания к экзамену.

Типовые варианты вопросов и заданий находятся в приложении к РП в разделе «Фонд оценочных средств».

В качестве итогового контроля используется традиционная система экзамена по билету при устно-письменном индивидуальном опросе.

В содержание экзаменационного билета входит один теоретический вопрос и одно практическое задание, из доступного для студентов списка " Вопросы и практические задания к экзамену".

Критерии и шкала оценки:

- оценка «отлично» выставляется студенту, если полностью раскрыто содержание вопросов билета;
- оценка «хорошо» выставляется студенту, если один из вопросов раскрыт частично;
- оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если дан полный ответ только на один из предложенных вопросов или имеются существенные неточности в ответах на оба вопроса;
- оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если ответы на вопросы отсутствуют или если даны ошибочные ответы на каждый вопрос.

Оценка за экзамен выставляется при наличии всех отчетов по лабораторным работам. Для пересчета набранных в течении семестра рейтинговых баллов (включая баллы за практические работы, коллоквиумы и ответы на экзамене) в обычные оценки используется шкала:

- от 55 до 69 – «удовлетворительно»;
- от 70 до 84 – «хорошо»;
- от 85 до 100 – «отлично».

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература:

1. Ведринский Р.В. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебник / Ведринский Р.В. – Ростов н/Д: ЮФУ, 2009 – 384 с. Режим доступа:
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=240937>
2. Ефремов Ю.С. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ефремов Ю.С. – М.-Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 457 с. Режим доступа:



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273446>

3. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] : учебное пособие / Крашенинин В.И. , Газенаур Е.Г. , Кузьмина Л.В. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>

Дополнительная литература:

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику: учебное пособие / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. - Томск: Эль Контент, 2010. - 112 с.: ил.,табл., схем. - ISBN 978-5-4332-0046-3; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>
2. Карлов, Н.В. Начальные главы квантовой механики / Н.В. Карлов, Н.А. Кириченко. - Москва: Физматлит, 2006. - 360 с. - ISBN 5-9221-0538-8; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68397>

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет»
<https://uni.ivanovo.ac.ru>

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» www.biblioclub.ru

Электронная библиотека ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru>

Электронный каталог НБ ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/ek>

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office (Libre Office), интернет-браузер Internet Explorer, Мой университет.

- Программа Origin для построения графиков функций и выполнения МНК-анализа.

- Программа для расчета геометрических и электронных характеристик молекул HyperChem.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории:

- для проведения занятий лекционного типа с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения, служащими для предоставления учебной информации большой аудитории;

- для проведения занятий семинарского типа, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения;

Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом специализированной учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в ЭИОС.

Демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия для занятий лекционного типа, обеспечивающие тематические иллюстрации: демонстрационное оборудование (модели, макеты, демонстрационные устройства), электронные пособия (презентации).



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

Автор рабочей программы дисциплины: д.х.н., профессор кафедры фундаментальной и прикладной химии Гиричева Н.И., к.х.н., доцент кафедры фундаментальной и прикладной химии Волкова Т.Г.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры фундаментальной и прикладной химии « 31 » августа 20 21 г., протокол № 1

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от « _____ » _____ 20 ____ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____ Л.Б. Кочетова
(подпись)

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от « _____ » _____ 20 ____ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____
(подпись)

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от « _____ » _____ 20 ____ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____
(подпись)