

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Соловьев Дмитрий Александрович
Должность: ректор ФГБОУ ВО Вавиловский университет
Дата подписания: 11.09.2025 15:16:21
Уникальный программный ключ:
528682d78e671e566ab07f01fe1ba2172f735a12

МИНИСТЕРСТВО СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Саратовский государственный университет генетики,
биотехнологии и инженерии имени Н. И. Вавилова»

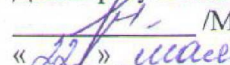
СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой

 /Буйлов В.Н./
«22» *март* 2024 г.

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета

 /Моргунова Н.Л./
«22» *март* 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Дисциплина

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ И
СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ

Специальность

06.05.01 Биотехнология и
биоинформатика

Направленность (профиль)

Генетика и селекция
сельскохозяйственных
животных

Квалификация
выпускника

Биотехнолог и биоинформатик

Нормативный срок
обучения

5 лет

Форма обучения

очная

Разработчик: доцент, Кондрашова А.В.


(подпись)

Саратов 2024

1. Цель освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование у обучающихся навыков применения информации о строении молекул и методов квантовой химии для профессионального использования в биоинформатике.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

В соответствии с учебным планом по специальности 06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика дисциплина «Квантовая химия и строение молекул» относится к обязательной части первого блока.

Дисциплина базируется на знаниях, имеющихся у обучающихся при получении среднего (полного) общего или среднего профессионального образования.

Дисциплина «Квантовая химия и строение молекул» базируется на изучении следующих дисциплин: «Молекулярная генетика», «Практическая генетика», «Биоинформатика», «Генная инженерия», «Анализ биоинформационных данных».

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Изучение данной дисциплины направлено на формирование у обучающихся компетенции (-ий), представленных в табл. 1

Таблица 1

Требования к результатам освоения дисциплины

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции (или ее части)	Индикаторы достижения компетенций	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны:		
				знать	уметь	владеть
1	2	3	4	5	6	7
1	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 – 2.3 Использует специализированные знания фундаментальных разделов химии для проведения исследований в области биоинженерии, биоинформатики и смежных дисциплин (модулей)	Основные идеи и положения квантовой химии, основы математического аппарата квантовой химии, основные идеи и характеристики современных вычислительных методов квантовой химии	Применять полученные знания при рассмотрении общехимических вопросов, интерпретировать основные положения химии с точки зрения квантовой теории, применять результаты расчетов для интерпретации свойств и реакционной способности молекул	Приемами простых квантово-механических и квантово-химических расчетов и их различных вариантов с применением ПК

4. Объём, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часов.

Таблица 2

Объем дисциплины

	Количество часов										
	Всего	в т.ч. по семестрам									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Контактная работа – всего, в т.ч.	60,2				60,2						
<i>аудиторная работа:</i>	60				60						
лекции	20				20						
лабораторные	40				40						
практические	-				-						
<i>промежуточная аттестация</i>	0,2				0,2						
<i>контроль</i>	17,8				17,8						
Самостоятельная работа	66				66						
Форма итогового контроля	Э				Э						
Курсовой проект (работа)	-				-						

Таблица 3

Структура и содержание дисциплины

№ п/п	Тема занятия Содержание	Неделя семестра	Контактная работа			Самостоятельная работа	Контроль	
			Вид занятия	Форма проведения	Количество часов	Количество часов	Вид	Форма
1	2	3	4	5	6	7	8	9
4 семестр								
1.	Предмет квантовой химии и теории строения молекул. Квантовая химия – одна из областей квантовой механики. Феноменологические основы квантовой механики. Феноменологическая формулировка квантовой механики.	1	Л	Т	2		ВК	УО
2.	Феноменологические основы квантовой механики. Корпускулярно-волновой дуализм.	1	ЛЗ	Т	4	4	ТК	УО
3.	Феноменологические основы квантовой механики.	2	ЛЗ	Т	4	4	ТК	УО СЗ

1	2	3	4	5	6	7	8	9
	Элементы квантовой механики. Теория атома по Резерфорду и Бору.							
4.	Предмет квантовой химии и теории строения молекул. Волновая функция. Уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции. Условия, которым должна удовлетворять волновая функция.	3	Л	Т	2		ТК	УО
5.	Вводные математические сведения. Волновая функция и ее физический смысл. Условия волновой функции.	3	ЛЗ	Т	4	4	ТК	УО
6.	Вводные математические сведения. Уравнение Шредингера.	4	ЛЗ	Т	4	4	ТК	ПО
7.	Квантово-химическое описание простых квантовых систем. Типы микрочастиц. Стандартная модель. Операторы. Постулаты квантовой механики.	5	Л	Т	2		ТК	УО
8.	Фундаментальный принцип квантовой механики. Типы микрочастиц. Стандартная модель.	5	ЛЗ	Т	4	4	ТК	УО
9.	Аксиоматическая формулировка квантовой механики. Операторы основных физических величин и их свойства. Постулаты квантовой механики. Рубежный контроль.	6	ЛЗ	Т	4	4	РК ТР	КР Д
10	Квантово-химическое описание простых квантовых систем. Одномерное движение свободной частицы. Трехмерное движение свободной частицы. Движение частицы в одномерном бесконечном потенциальном ящике. Частица в ящике с конечными стенками. Столкновение частиц с потенциальным барьером. Проявление туннельного эффекта и надбарьерного отражения в химии.	7	Л	В	2		ТК	УО
11	Описание простых квантовых систем. Одномерное движение свободной частицы. Трехмерное движение свободной частицы.	7	ЛЗ	Т	4	4	ТК	УО
12	Описание простых квантовых систем. Движение частицы в одномерном бесконечном потенциальном ящике. Столкновение частиц с потенциальным барьером.	8	ЛЗ	Т	4	4	ТК	УО
13	Квантовый гармонический осциллятор. Гармонический осциллятор. Квантовый гармонический осциллятор в химии. Правила отбора.	9	Л	В	2		ТК	УО
14	Квантово-механические задачи. Гармонический осциллятор. Стационарное уравнение Шредингера для гармонического осциллятора.	9	ЛЗ	Т	4	4	ТК	ПО
15	Квантово-механические задачи. Квантовый гармонический осциллятор в химии.	10	ЛЗ	Т	4	4	ТК	УО
16	Теория атома водорода и водородоподобных атомов.	11	Л	В	2		ТК	УО

1	2	3	4	5	6	7	8	9
	Движение квантовой частицы в поле центральной силы. Жесткий ротатор. Жесткий ротатор в химии: вращение молекул							
17	Движение квантовой частицы в поле центральной силы. Центральная сила.	11	ЛЗ	Т	4	2	ТК	УО
18	Движение квантовой частицы в поле центральной силы. Жесткий ротатор. Рубежный контроль.	12	ЛЗ	Т	4	2	РК	УО
19	Теория атома водорода. Водородоподобные атомы. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Водородоподобные системы. Энергия. Квантовые числа.	13	Л	Т	2		ТК	УО
20	Водородоподобные атомы. Решение стационарного уравнения Шредингера для атома водорода.	13	ЛЗ	Т	4	4	ТК	ПО
21	Водородоподобные атомы. Квантовые числа. Спектр водородоподобного атома.	14	ЛЗ	Т	4	4	ТК	УО
22	Теория атома водорода и водородоподобных ионов. Движение электрона в атоме водорода. Принцип запрета Паули. Частицы с нулевыми или целочисленными спинами. Многоэлектронные атомы. Физическая интерпретация квантовых чисел и связь движения с моментом импульса.	15	Л	Т	2		ТК	УО
23	Теория атома водорода и водородоподобных ионов. Движение электрона в атоме водорода. Принцип запрета Паули.	15	ЛЗ	Т	4	2	ТК	УО
24	Теория атома водорода и водородоподобных атомов. Частицы с нулевым или целочисленным спинами. Многоэлектронные атомы.	16	ЛЗ	Т	4	2	ТК	УО
25	Химическая связь и физические эффекты, приводящие к ее образованию. Химическая связь. Образование ковалентной связи в молекуле водорода. Образование ионной связи.	17	Л	В	2		ТК	УО
26	Химическая связь Учение о химической связи. Образование ковалентной связи в молекуле водорода. Неполярная и полярная ковалентная связь.	17	ЛЗ	Т	4	4	ТК	ПО
27	Химическая связь. Ионная связь. Образование ионной связи на примере молекулы хлорида натрия.	18	ЛЗ	Т	4		ТК	ПО
28	Химическая связь и физические эффекты, приводящие к ее образованию. Методы молекулярных орбиталей (МО). Метод Хартри-Фока. Молекулярные свойства, определяемые электронной ВФ. ВЗМО и НСМО.	19	Л	Т	2		ТК	УО
29	Методы молекулярных орбиталей (МО).	19	ЛЗ	Т	4	2	ТК	ПО

1	2	3	4	5	6	7	8	9
	Метод Хартри-Фока.							
30	Молекулярные свойства, определяемые электронной ВФ. ВЗМО и НСМО. Теорема Купманса. Связывающая молекулярная орбиталь.	20	ЛЗ	Т	2	4	ТК	УО
31	Рубежный контроль	Неполная неделя	ЛЗ		2		РК	Т
32	Выходной контроль				0,2	17,8	ВыхК	Э
Итого:					60,2	66		

Примечание:

Условные обозначения:

Виды аудиторной работы: Л – лекция, ЛЗ – лабораторное занятие

Формы проведения занятий: В – лекция-визуализация, Т – лекция/занятие, проводимое в традиционной форме

Виды контроля: ВК – входной контроль, РК – рубежный контроль, ТК – текущий контроль, ВыхК – выходной контроль, ТР – творческая работа

Форма контроля: УО – устный опрос, ПО – письменный опрос, СЗ – ситуационная задача, Т – тестирование, Д - доклад, Э – экзамен.

5. Образовательные технологии

Организация занятий по дисциплине «Квантовая химия и строение молекул» проводится по видам учебной работы: лекции, лабораторные занятия, текущий контроль.

Реализация компетентностного подхода в рамках специальности 06.05.01 Биотехнология и биоинформатика предусматривает использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий в сочетании с внеаудиторной работой для формирования и развития профессиональных навыков обучающихся.

Лекционные занятия проводятся в поточной аудитории с применением мультимедийного проектора в виде учебной презентации. Основные моменты лекционных занятий конспектируются. Отдельные темы предлагаются для самостоятельного изучения с обязательным составлением конспекта (контролируется).

Целью лабораторных занятий является систематизация, закрепление и углубление знаний теоретического характера. Лабораторная работа по квантовой химии – это форма обучения, позволяющая проверить умения и навыки выполнения вычислительного эксперимента по конкретно изучаемому материалу. Она основана на процессе осознания изучаемого материала на основе самостоятельной предварительной учебной деятельности обучающегося.

Для достижения этих целей используются как традиционные формы работы – решение задач, выполнение лабораторных работ, так и интерактивные методы – проблемное занятие.

Решение задач позволяет обучиться формировать у обучающихся определенные виды деятельности, связанные с применением знаний в конкретных

ситуациях; систематизировать и закрепить теоретические знания обучающихся; проверить степень усвоения одной темы или вопроса.

В процессе решения задач обучающийся сталкивается с ситуацией вызова и достижения, данный методический прием способствует в определенной мере повышению у обучающихся мотивации как непосредственно к учебе, так и к деятельности вообще.

Сущность проблемного занятия состоит в том, что знания обучающимся не сообщаются в готовом виде, перед ними ставится проблема для самостоятельного решения, в ходе которого они приходят к осознанным знаниям. Это один из методов интерактивного обучения, способствующий организации поисковой деятельности обучающихся, формированию у них навыков продуктивного, творческого изучения дисциплины.

Самостоятельная работа охватывает проработку обучающимися отдельных вопросов теоретического курса, выполнение домашних работ, включающих решение задач, анализ конкретных ситуаций и подготовку их презентаций, и т.п.

Самостоятельная работа осуществляется в индивидуальном и групповом формате. Самостоятельная работа выполняется обучающимися на основе учебно-методических материалов дисциплины (приложение 2). Самостоятельно изучаемые вопросы курса включаются в экзаменационные вопросы.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература (библиотека Вавиловского университета)

№ п/п	Наименование, ссылка для электронного доступа или кол-во экземпляров в библиотеке	Автор(ы)	Место издания, издательство, год	Используется при изучении разделов (из п. 4, таб. 3)
1	2	3	4	5
1.	Квантовая механика: учебное пособие https://znaniyum.ru/catalog/product/2167330	Ю.А. Байков, В.М. Кузнецов	Москва: Лаборатория знаний, 2024	1-31

б) дополнительная литература

№ п/п	Наименование, ссылка для электронного доступа или кол-во экземпляров в библиотеке	Автор(ы)	Место издания, издательство, год	Используется при изучении разделов (из п. 4.3)
1	2	3	4	5
1.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела https://znaniyum.com/catalog/product/1984036	В.Г. Цирельсон	Москва: Лаборатория знаний, 2021	1-31
2.	Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул https://znaniyum.com/catalog/product/1984034	И. Майер	Москва: Лаборатория знаний, 2021	1-31

в) ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Для освоения дисциплины рекомендуются следующие сайты информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

- официальный сайт университета - <https://www.vavilovsar.ru/biblioteka>

- Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов - <http://www.fcior.edu.ru/>
- Электронная библиотека учебных материалов по химии- <http://www.chem.msu.su>
- Электронная библиотека Российской государственной библиотеки - <http://sigla.rsl.ru>

г) периодические издания

Не предусмотрено

д) информационные справочные системы и профессиональные базы данных

Для пользования стандартами и нормативными документами рекомендуется применять информационные справочные системы и профессиональные базы данных, доступ к которым организован библиотекой университета через локальную вычислительную сеть.

Для пользования электронными изданиями рекомендуется использовать следующие информационные справочные системы и профессиональные базы данных:

1. Электронная библиотечная система «Лань» <http://e.lanbook.com>.

Электронная библиотека издательства «Лань» – ресурс, включающий в себя как электронные версии книг издательства «Лань», так и коллекции полнотекстовых файлов других российских издательств (доступ: после регистрации с компьютера университета – доступ с любого компьютера, подключенного к сети Интернет).

2. Научная библиотека университета <https://www.vavilovsar.ru/biblioteka>

Базы данных содержат сведения о всех видах литературы, поступающей в фонд библиотеки. Более 1400 полнотекстовых документов (учебники, учебные пособия и т.п.) (доступ: с любого компьютера, подключенного к сети Интернет).

3. ЭБС IPR SMART <http://iprbookshop.ru>

ЭБС обеспечивает возможность работы с постоянно пополняемой базой лицензионных изданий (более 40000) по широкому спектру дисциплин – учебные, научные издания и периодика, представленные более 600 федеральными, региональными и вузовскими издательствами, научно-исследовательскими институтами и ведущими авторскими коллективами (доступ: после регистрации с компьютера университета и с любого компьютера, подключенного к сети Интернет).

е) информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса:

- программное обеспечение:

№ п/п	Наименование раздела учебной дисциплины (модуля)	Наименование программы	Тип программы
1	Все разделы дисциплины	<i>Вспомогательное программное обеспечение:</i>	Вспомогательная

		«Р7-Офис» Предоставление неисключительных прав на программное обеспечение «Р7-Офис». Лицензиат – ООО «Солярис Технолоджис», г. Саратов. Договор № ЦЗ-1К-033 от 21.12.2022 г. Срок действия договора: с 01.01.2023 г. Лицензия на 3 года с правом последующего бессрочного использования, для образовательных учреждений.	
2	Все разделы дисциплины	<i>Вспомогательное программное обеспечение:</i> Kaspersky Endpoint Security (антивирусное программное обеспечение). Лицензиат – ООО «Солярис Технолоджис», г. Саратов. Сублицензионный договор № 6-1128/2023/КСП-107 от 11.12.2023 г. Срок действия договора: 01.01.2024–31.12.2024 г.	Вспомогательная

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения учебных занятий по данной дисциплине используются учебные аудитории №№ 510, 532, 533, 515, 528.

Учебные аудитории для проведения учебных занятий оснащены оборудованием и техническими средствами обучения: лабораторное оборудование (установки, химическая посуда); химические реактивы; плакаты; для демонстрации медиаресурсов имеются проектор, экран, компьютер или ноутбук:

https://vavilovsar.ru/sveden/objects/cabinets/study_rooms.html,

https://vavilovsar.ru/sveden/objects/cabinets/practice_rooms.html .

Помещения для самостоятельной работы обучающихся (№ 415 и читальный зал библиотеки) оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета:

https://vavilovsar.ru/sveden/objects/cabinets/study_rooms.html,

https://vavilovsar.ru/sveden/objects/cabinets/practice_rooms.html .

8. Оценочные материалы

Оценочные материалы, сформированные для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине «Неорганическая и аналитическая химия» разработан на основании следующих документов:

- Федерального закона Российской Федерации от 29.12.2012 N 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации» (с изменениями и дополнениями);

- приказа Минобрнауки РФ от 06.04.2021 № 245 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры»;

Оценочные материалы представлены в приложении 1 к рабочей программе дисциплины и включают в себя:

- перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы;
- описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания;
- типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы;
- методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

9. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы

Перечень учебно-методического обеспечения самостоятельной работы представлен в приложении 2 к рабочей программе по дисциплине «Квантовая химия и строение молекул».

10. Методические указания для обучающихся по изучению дисциплины «Квантовая химия и строение молекул»

Методические указания по изучению дисциплины «Квантовая химия и строение молекул» включают в себя*:

1. Краткий курс лекций.
2. Методические указания по выполнению лабораторных работ.

*Рассмотрено и утверждено на заседании
кафедры «Общеобразовательные дисциплины»
«22» мая 2024 года (протокол № 10).*