

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет»  
Министерства здравоохранения Российской Федерации

Факультет промышленной технологии лекарств

Научно-образовательный центр биофизических исследований в сфере фармацевтики

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**Б1.В.ДВ.05.02 МЕТОДЫ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОГО  
МОДЕЛИРОВАНИЯ БИОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И ТРАНСПОРТА  
МОЛЕКУЛ**

Направление подготовки: 19.03.01 Биотехнология

Профиль подготовки: Производство биофармацевтических препаратов

Формы обучения: очная

Квалификация (степень) выпускника: Бакалавр

Год набора: 2022

Срок получения образования: 4 года

Объем: в зачетных единицах: 2 з.е.  
в академических часах: 72 ак.ч.

**Разработчики:**

Профессор научно-образовательного центра биофизических исследований в сфере фармацевтики, доктор физико-математических наук Циовкин Ю. Ю.

Рабочая программа дисциплины (модуля) составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 19.03.01 Биотехнология, утвержденного приказом Минобрнауки России от 10.08.2021 № 736, с учетом трудовых функций профессиональных стандартов: "Специалист по промышленной фармации в области исследований лекарственных средств", утвержден приказом Минтруда России от 22.05.2017 № 432н; "Специалист в области биотехнологии биологически активных веществ", утвержден приказом Минтруда России от 22.07.2020 № 441н.

**Согласование и утверждение**

№	Подразделение или коллегиальный орган	Ответственное лицо	ФИО	Виза	Дата, протокол (при наличии)
1	Научно-образовательный центр биофизических исследований в сфере фармацевтики	Заведующий кафедрой, руководитель подразделения, реализующего ОП	Васин А. В.	Рассмотрено	31.05.2022, № 11
2	Кафедра биотехнологии	Ответственный за образовательную программу	Топкова О. В.	Согласовано	07.06.2022
3	Методическая комиссия факультета	Председатель методической комиссии/совета	Алексеева Г. М.	Согласовано	01.07.2022, № 7

**Согласование и утверждение образовательной программы**

№	Подразделение или коллегиальный орган	Ответственное лицо	ФИО	Виза	Дата, протокол (при наличии)
1	факультет промышленной технологии лекарств	Декан, руководитель подразделения	Куваева Е. В.	Согласовано	23.06.2022, № 11

## 1. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

*Компетенции, индикаторы и результаты обучения*

УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач

УК-1.5 Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки

*Знать:*

УК-1.5/Зн4 Знать основные принципы и закономерности цифрового представления информации для решения поставленных задач.

УК-1.5/Зн8 Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки

*Уметь:*

УК-1.5/Ум5 Уметь анализировать задачу, выделяя ее базовые составляющие, определять, интерпретировать и ранжировать информацию, требуемую для решения поставленной задачи.

*Владеть:*

УК-1.5/Нв1 Владеет навыками и методами постановки задач в математической форме, способами оптимизации и выбора оптимального метода решения, методами проведения оценки полученных результатов.

ПК-П4 Способен проводить работы по фармацевтической разработке лекарственных средств

ПК-П4.1 Проводит исследования, испытания и экспериментальные работы по фармацевтической разработке в соответствии с утвержденными планами

*Знать:*

ПК-П4.1/Зн14 Знает основные направления в фармацевтической разработке лекарственных субстанций

*Уметь:*

ПК-П4.1/Ум10 Умеет проводить исследования, испытания и экспериментальные работы по фармацевтической разработке лекарственных субстанций в соответствии с утвержденным планом

## 2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина (модуль) Б1.В.ДВ.05.02 «Методы физико-математического моделирования биохимических реакций и транспорта молекул» относится к формируемой участниками образовательных отношений части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 7.

Предшествующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.ДВ.02.01 3-D графика в системе "КОМПАС-ГРАФИКА";

Б1.В.ДВ.04.02 Биотрансформация лекарственных веществ;

Б1.В.ДВ.03.01 Биохимические основы иммунитета;

Б1.О.09 Инженерная графика;

Б1.О.03 Информационные технологии в профессиональной деятельности;

Б1.О.28 Оборудование и основы проектирования биотехнологических производств;

Б1.О.14 Органическая химия;

Б1.О.18 Основы биохимии и молекулярной биологии;  
 Б1.В.ДВ.03.02 Основы генетической инженерии;  
 Б1.В.08 Основы клеточной инженерии;  
 ФТД.В.02 Основы начертательной геометрии;  
 Б1.О.05 Прикладная математика;  
 Б1.В.10 Технология выделения и очистки биологически активных веществ;  
 Б1.О.13 Философия;  
 Б1.В.ДВ.04.01 Химия биологически активных веществ;  
 Б1.В.ДВ.02.02 Численные методы;

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.ДВ.08.02 Вирусы в биотехнологии и медицине;  
 Б1.В.ДВ.07.01 Инженерная энзимология;  
 Б1.В.ДВ.05.01 Моделирование биотехнологических процессов;  
 Б1.В.ДВ.08.03 Наноматериалы в биотехнологии;  
 Б1.О.28 Оборудование и основы проектирования биотехнологических производств;  
 Б1.В.18 Организация производства по GMP;  
 Б1.В.ДВ.08.01 Основы микологии;  
 Б1.В.ДВ.07.02 Основы производства лекарственных средств из плазмы крови;  
 Б3.О.01(Д) Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы;  
 Б1.В.13 Право интеллектуальной собственности в производстве лекарственных средств;  
 Б1.В.ДВ.06.01 Применение капиллярного электрофореза и хроматографических методов анализа в биотехнологии;  
 Б2.В.01(П) производственная практика, преддипломная практика;  
 Б1.О.29 Статистические методы обработки данных с использованием программного обеспечения;  
 Б1.В.10 Технология выделения и очистки биологически активных веществ;  
 Б1.В.ДВ.06.02 Цифровые устройства измерения, контроля и управления;

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и образовательной программой.

### 3. Объем дисциплины и виды учебной работы

Период обучения	Общая трудоемкость (часы)	Общая трудоемкость (ЗЕТ)	Контактная работа (часы, всего)	Консультации в период теоретического обучения (часы)	Лекции (часы)	Практические занятия (часы)	Самостоятельная работа студента (часы)	Промежуточная аттестация (часы)
Седьмой семестр	72	2	42	12	14	16	28	Зачет (2)
Всего	72	2	42	12	14	16	28	2

### 4. Содержание дисциплины

#### 4.1. Разделы, темы дисциплины и виды занятий

Наименование раздела, темы	Всего	Консультации в период теоретического обучения	Лекции	Практические занятия	Самостоятельная работа студента	Планируемые результаты обучения, соответствующие результатам освоения программы
<b>Раздел 1. Введение. Вычислительный эксперимент и его роль в моделировании химических реакций и молекулярного транспорта.</b>	<b>10</b>	<b>4</b>	<b>2</b>		<b>4</b>	УК-1.5 ПК-П4.1
Тема 1.1. Вычислительный эксперимент и его роль в дизайне молекул и соединений.	10	4	2		4	
<b>Раздел 2. Физико-математические основы современных методов моделирования химических реакций</b>	<b>22</b>	<b>2</b>	<b>4</b>	<b>6</b>	<b>10</b>	УК-1.5 ПК-П4.1
Тема 2.1. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Квантовые числа. Основы понятия об электронной орбитали.	16	2	2	4	8	
Тема 2.2. Химические связи. Метод молекулярных орбиталей	6		2	2	2	
<b>Раздел 3. Обзор современных квантово-химических методов</b>	<b>12</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>4</b>	<b>4</b>	УК-1.5 ПК-П4.1
Тема 3.1. Теория функционала плотности	12	2	2	4	4	
<b>Раздел 5. Транспорт веществ через биологические мембраны. Пассивный и активный транспорт.</b>	<b>8</b>		<b>2</b>	<b>2</b>	<b>4</b>	УК-1.5 ПК-П4.1
Тема 5.1. Общие вопросы транспорта химических веществ через мембраны	8		2	2	4	
<b>Раздел 6. Перенос массы. Уравнение диффузии и его решение</b>	<b>10</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>4</b>	УК-1.5 ПК-П4.1
Тема 6.1. Уравнение диффузии и его решение. Начальные и граничные условия	10	2	2	2	4	

<b>Раздел 7. Поток ионов через мембрану. Решение уравнения Нернста-Планка в приближении Гольдмана</b>	<b>8</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	УК-1.5 ПК-П4.1
Тема 7.1. Уравнение Нернста-Планка (электродиффузное уравнение)	8	2	2	2	2	
<b>Итого</b>	<b>70</b>	<b>12</b>	<b>14</b>	<b>16</b>	<b>28</b>	

#### 4.2. Содержание разделов, тем дисциплин и формы текущего контроля

##### ***Раздел 1. Введение. Вычислительный эксперимент и его роль в моделировании химических реакций и молекулярного транспорта.***

*Тема 1.1. Вычислительный эксперимент и его роль в дизайне молекул и соединений.*

Основы квантовой механики. Матричная механика Гейзенберга. Уравнение Шредингера. Операторы импульса, момента импульса, энергии. Матричное представление операторов. Статистический смысл волновой функции. Принцип неопределенности Гейзенберга. Свободное движение частицы. Волны Де Бройля. Представление Дирака.

##### ***Раздел 2. Физико-математические основы современных методов моделирования химических реакций***

*Тема 2.1. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Квантовые числа. Основы понятия об электронной орбитали.*

Уравнение Шредингера и его решение для атома водорода. Атом водорода (разделение переменных). Радиальная часть (полиномы Лагерра). Сферическая часть (шаровые функции, полиномы Лежандра). Квантовые числа. Форма электронных облаков. Спин электрона. Операторы спина. Одноэлектронные спиновые функции. Понятия об электронной орбитали. Спин электрона и уравнение Дирака. Два электрона со спинами. Принцип Паули. Многоэлектронная волновая функция

Текущий контроль

Вид (форма) контроля, оценочные материалы
Посещение учебных занятий (балльно-рейтинговая система)
Протокол практического занятия

*Тема 2.2. Химические связи. Метод молекулярных орбиталей*

Классификация химических связей и их особенности. Многоэлектронная волновая функция и методы построения молекулярных орбиталей.

##### ***Раздел 3. Обзор современных квантово-химических методов***

*Тема 3.1. Теория функционала плотности*

Понятие электронной плотности. Подходы, предшествующие современной теории функционала плотности: методы Томаса-Ферми и Томаса-Ферми-Дирака, метод Слейтера (X-alpha), расчет обменной энергии однородного электронного газа, вывод уравнений. Основные теоремы теории функционала плотности (ТФП, DFT). Вспомогательная система невзаимодействующих электронов и вывод уравнений Кона-Шэма. Приближение локальной плотности (LDA). Обменные и корреляционные функционалы. Локальные и градиентно-скорректированные (GGA) функционалы плотности. Иерархия современных методов DFT. Применение DFT для расчетов свойств возбужденных состояний: методы TD-DFT. Внутренние недостатки современных методов (самовзаимодействие электронов, неучет дисперсионных взаимодействий) и пути их устранения.

Текущий контроль

Вид (форма) контроля, оценочные материалы
Посещение учебных занятий (балльно-рейтинговая система)
Протокол практического занятия

### ***Раздел 5. Транспорт веществ через биологические мембраны. Пассивный и активный транспорт.***

#### *Тема 5.1. Общие вопросы транспорта химических веществ через мембраны*

1. Пассивный транспорт и облегченная диффузия. Электрофорез. Электродиффузия. Изменение свободной энергии системы. Уравнение Фика. Осмос.
2. Активный транспорт

Текущий контроль

Вид (форма) контроля, оценочные материалы
Посещение учебных занятий (балльно-рейтинговая система)
Протокол практического занятия

### ***Раздел 6. Перенос массы. Уравнение диффузии и его решение***

#### *Тема 6.1. Уравнение диффузии и его решение. Начальные и граничные условия*

Уравнение диффузии и его решение. Начальные и граничные условия. Решение уравнения диффузии в простейших случаях

### ***Раздел 7. Поток ионов через мембрану. Решение уравнения Нернста-Планка в приближении Гольдмана***

#### *Тема 7.1. Уравнение Нернста-Планка (электродиффузное уравнение)*

Зависимость плотности диффузного потока ионов от концентрации ионов и от градиента потенциала. Вывод уравнения Нернста-Планка. Предельный переход к уравнению Фика. Решение уравнения Нернста-Планка в простейших случаях. Равновесие Доннана. Доннановская разность потенциалов.

### **4.3. Содержание занятий семинарского типа.**

**Очная форма обучения. Консультации в период теоретического обучения (12 ч.)**

**Раздел 1. Введение. Вычислительный эксперимент и его роль в моделировании химических реакций и молекулярного транспорта. (4 ч.)**

Тема 1.1. Вычислительный эксперимент и его роль в дизайне молекул и соединений. (4 ч.)

**Раздел 2. Физико- математические основы современных методов моделирования химических реакций (2 ч.)**

Тема 2.1. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Квантовые числа. Основы понятия об электронной орбитали. (2 ч.)

Консультация по порядку выполнения самостоятельной работы и сложным вопросам дисциплины

Тема 2.2. Химические связи. Метод молекулярных орбиталей

**Раздел 3. Обзор современных квантово-химических методов (2 ч.)**

Тема 3.1. Теория функционала плотности (2 ч.)

Разбор материала, вынесенного на самостоятельное изучение - Локальные и градиентно-скорректированные (GGA) функционалы плотности. Иерархия современных методов DFT. Применение DFT для расчетов свойств возбужденных состояний: методы TD-DFT. Внутренние недостатки современных методов (самовзаимодействие электронов, неучет дисперсионных взаимодействий) и пути их устранения.

**Раздел 5. Транспорт веществ через биологические мембраны. Пассивный и активный транспорт.**

Тема 5.1. Общие вопросы транспорта химических веществ через мембраны

**Раздел 6. Перенос массы. Уравнение диффузии и его решение (2 ч.)**

Тема 6.1. Уравнение диффузии и его решение. Начальные и граничные условия (2 ч.)

**Раздел 7. Поток ионов через мембрану.**

**Решение уравнения Нернста-Планка в приближении Гольдмана (2 ч.)**

Тема 7.1. Уравнение Нернста-Планка (электродиффузное уравнение) (2 ч.)

#### **4.4. Содержание занятий лекционного типа.**

**Очная форма обучения. Лекции (14 ч.)**

**Раздел 1. Введение. Вычислительный эксперимент и его роль в моделировании химических реакций и молекулярного транспорта. (2 ч.)**

Тема 1.1. Вычислительный эксперимент и его роль в дизайне молекул и соединений. (2 ч.)

Матричная механика Гейзенберга. Уравнение Шредингера. . Операторы импульса, момента импульса, энергии. Матричное представление операторов. Статистический смысл волновой функции. Принцип неопределенности Гейзенберга. Свободное движение частицы. Волны Де Бройля. Представление Дирака

**Раздел 2. Физико- математические основы современных методов моделирования химических реакций (4 ч.)**

Тема 2.1. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Квантовые числа. Основы понятия об электронной орбитали. (2 ч.)

Уравнение Шредингера и его решение для атома водорода. Атом водорода (разделение переменных). Радиальная часть (полиномы Лагерра). Сферическая часть (шаровые функции,



полиномы Лежандра). Квантовые числа. Форма электронных облаков. Спин электрона. Операторы спина. Одноэлектронные спиновые функции. Понятия об электронной орбитали. Спин электрона и уравнение Дирака. Два электрона со спинами. Принцип Паули. Многоэлектронная волновая функция

Тема 2.2. Химические связи. Метод молекулярных орбиталей (2 ч.)

Классификация химических связей и их особенности. Многоэлектронная волновая функция и методы построения молекулярных орбиталей.

### **Раздел 3. Обзор современных квантово-химических методов (2 ч.)**

Тема 3.1. Теория функционала плотности (2 ч.)

Понятие электронной плотности. Подходы, предшествующие современной теории функционала плотности: методы Томаса-Ферми и Томаса-Ферми-Дирака, метод Слейтера (X-alpha), расчет обменной энергии однородного электронного газа, вывод уравнений. Основные теоремы теории функционала плотности (ТФП, DFT). Вспомогательная система невзаимодействующих электронов и вывод уравнений Кона-Шэма. Приближение локальной плотности (LDA). Обменные и корреляционные функционалы

Основные пакеты квантово-химических программ, их возможности. Логическая структура типичных неэмпирических (ab-initio) и DFT- программ расчета электронной структуры и свойств молекулярных систем. Методы оптимизации геометрии молекул. Расчеты поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) и свойств, связанных со строением ППЭ: ИК- и КР-спектров, термодинамических характеристик молекул, активационных барьеров химических реакций. Расчеты электронных спектров поглощения и свойств возбужденных состояний. Достоверность получаемых результатов, средняя точность расчетов.

### **Раздел 5. Транспорт веществ через биологические мембраны. Пассивный и активный транспорт. (2 ч.)**

Тема 5.1. Общие вопросы транспорта химических веществ через мембраны (2 ч.)

Общие принципы молекулярного дизайна веществ с заданной биологической активностью

### **Раздел 6. Перенос массы. Уравнение диффузии и его решение (2 ч.)**

Тема 6.1. Уравнение диффузии и его решение. Начальные и граничные условия (2 ч.)

Уравнение Фика и его общее решение. Коэффициент диффузии. Решение Уравнения диффузии в некоторых случаях. Численное решение уравнения диффузии

### **Раздел 7. Поток ионов через мембрану.**

#### **Решение уравнения Нернста-Планка в приближении Гольдмана (2 ч.)**

Тема 7.1. Уравнение Нернста-Планка (электродиффузное уравнение) (2 ч.)

Зависимость плотности диффузного потока ионов от концентрации ионов и от градиента потенциала. Вывод уравнения Нернста-Планка. Предельный переход к уравнению Фика. Решение уравнения Нернста -Планка в простейших случаях. Равновесие Доннана. Доннановская разность потенциалов.

## **4.5. Содержание занятий семинарского типа.**

### **Очная форма обучения. Практические занятия (16 ч.)**

#### **Раздел 1. Введение. Вычислительный эксперимент и его роль в моделировании химических реакций и молекулярного транспорта.**

Тема 1.1. Вычислительный эксперимент и его роль в дизайне молекул и соединений.

#### **Раздел 2. Физико- математические основы современных методов моделирования химических реакций (6 ч.)**

Тема 2.1. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Квантовые числа. Основы понятия об электронной орбитали. (4 ч.)

1. Численное решение уравнения Шредингера для атома водорода
2. Построение s-p-d-f орбиталей для атома водорода

Тема 2.2. Химические связи. Метод молекулярных орбиталей (2 ч.)

Классификация химических связей и их особенности. Многоэлектронная волновая функция и методы построения молекулярных орбиталей.

### **Раздел 3. Обзор современных квантово-химических методов (4 ч.)**

Тема 3.1. Теория функционала плотности (4 ч.)

1. Расчет электронной структуры ОЦК металлов
2. Построение электронной плотности состояний. Анализ полученных результатов

### **Раздел 5. Транспорт веществ через биологические мембраны. Пассивный и активный транспорт. (2 ч.)**

Тема 5.1. Общие вопросы транспорта химических веществ через мембраны (2 ч.)

1. Расчет энергии образования комплекса с использованием модельных молекулярно-механических потенциалов
2. Определение силовых полей, используемых в молекулярном моделировании.

### **Раздел 6. Перенос массы. Уравнение диффузии и его решение (2 ч.)**

Тема 6.1. Уравнение диффузии и его решение. Начальные и граничные условия (2 ч.)

Решение уравнения Фика с заданными граничными и начальными условиями

### **Раздел 7. Поток ионов через мембрану.**

#### **Решение уравнения Нернста-Планка в приближении Гольдмана (2 ч.)**

Тема 7.1. Уравнение Нернста-Планка (электродиффузное уравнение) (2 ч.)

Методы решения уравнения Нернста - Планка. Начальные и граничные условия. Варьирование решения в зависимости от начальных и граничных условий

#### **4.6. Содержание самостоятельной работы обучающихся**

### **Очная форма обучения. Самостоятельная работа студента (28 ч.)**

#### **Раздел 1. Введение. Вычислительный эксперимент и его роль в моделировании химических реакций и молекулярного транспорта. (4 ч.)**

Тема 1.1. Вычислительный эксперимент и его роль в дизайне молекул и соединений. (4 ч.)

Подготовка к текущему контролю знаний и промежуточной аттестации

#### **Раздел 2. Физико-математические основы современных методов моделирования химических реакций (10 ч.)**

Тема 2.1. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Квантовые числа. Основы понятия об электронной орбитали. (8 ч.)

Подготовка к текущему контролю знаний и промежуточной аттестации

Тема 2.2. Химические связи. Метод молекулярных орбиталей (2 ч.)

Классификация химических связей и их особенности. Многоэлектронная волновая функция и методы построения молекулярных орбиталей.

### **Раздел 3. Обзор современных квантово-химических методов (4 ч.)**

Тема 3.1. Теория функционала плотности (4 ч.)

Изучение материала по теме: Локальные и градиентно-скорректированные (GGA) функционалы плотности. Иерархия современных методов DFT. Применение DFT для расчетов свойств возбужденных состояний: методы TD-DFT. Внутренние недостатки современных методов (самовзаимодействие электронов, неучет дисперсионных взаимодействий) и пути их устранения.

### **Раздел 5. Транспорт веществ через биологические мембраны. Пассивный и активный транспорт. (4 ч.)**

Тема 5.1. Общие вопросы транспорта химических веществ через мембраны (4 ч.)

Подготовка к текущему контролю знаний и промежуточной аттестации

### **Раздел 6. Перенос массы. Уравнение диффузии и его решение (4 ч.)**

Тема 6.1. Уравнение диффузии и его решение. Начальные и граничные условия (4 ч.)

## **Раздел 7. Поток ионов через мембрану.**

### **Решение уравнения Нернста-Планка в приближении Гольдмана (2 ч.)**

Тема 7.1. Уравнение Нернста-Планка (электродиффузное уравнение) (2 ч.)

Решение уравнения Нернста-Планка. Предельный переход к уравнению Фика. Решение уравнения Нернста -Планка в простейших случаях. Равновесие Доннана. Доннановская разность потенциалов.

## **5. Порядок проведения промежуточной аттестации**

*Промежуточная аттестация: Зачет, Четвертый семестр.*

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета. В рамках проведения зачета преподаватель оценивает результат автоматизированного тестирования по дисциплине.

1. Зачет проводится в период теоретического обучения. Не допускается проведение зачета на последних аудиторных занятиях.

2. Преподаватель принимает зачет только при условии прохождения студентом идентификации в установленном порядке.

3. Результат зачета объявляется студенту непосредственно после его сдачи, затем выставляется в электронную экзаменационную ведомость. Оценка проставляется в электронную ведомость, в случае неявки студента для сдачи зачета в электронной ведомости вместо оценки делается запись «не явился».

Тестирование проводится в электронной информационно-образовательной среде СПХФУ с применением SafeExam Browser и видеofиксации процесса прохождения промежуточной аттестации. Тестирование проводится с ограничением по времени не более 4,5 минут на одно тестовое задание, не более 45 минут на тестирование в целом. Студенту для получения положительного результата предоставляется 1 попытка для прохождения тестирования.

Оценивание тестирования осуществляется следующим образом:

70% правильных ответов и более - "зачтено"

менее 70% правильных ответов - "не зачтено"

Оценка за зачет проставляется на основании итогового балла, отраженного в рейтинговом листе:

"Зачтено" 600 - 1000 баллов,

"Не зачтено" - менее 600 баллов.

Если по итогам проведенной промежуточной аттестации хотя бы одна из компетенций не сформирована на уровне требований к дисциплине в соответствии с образовательной программой (результаты обучающегося не соответствуют критерию сформированности компетенции), обучающемуся выставляется оценка «не зачтено».

## **6. Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение дисциплины**

### **6.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы**

*Основная литература*

1. Эйдельман Е. Д. Молекулярная физика. Термодинамика [Электронный ресурс]: - Санкт-Петербург: Изд-во СПХФА, 2012. - 112 с.

2. Эйдельман Е.Д. Физика с элементами биофизики [Электронный ресурс]: - Москва: ГЭОТАР-Медиа, 2013. - 512 - Режим доступа: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970425244.html>

3. Эйдельман Е. Д. Элементы гидродинамики [Электронный ресурс]: - Санкт-Петербург: Изд-во СПХФА, 2014. - 56 с.

*Дополнительная литература*

1. Жуковский Ю. С. Повторим физику [Электронный ресурс]: - Санкт-Петербург: Изд-во СПХФА, 2016. - 32 с.

2. Липин А. Л. Сборник вопросов и задач по курсу "Физика" [Электронный ресурс]: - Санкт-Петербург: Изд-во СПХФА, 2017. - 92 с.

## **6.2. Профессиональные базы данных и ресурсы «Интернет», к которым обеспечивается доступ обучающихся**

*Профессиональные базы данных*

Не используются.

*Ресурсы «Интернет»*

1. <http://www.quantum-espresso.org/> - Quantum ESPRESSO is an integrated suite of Open-Source computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale. It is based on density-functional theory, plane waves, and pseudopotentials.

2. <https://www.sciencedirect.com/topics/pharmacology-toxicology-and-pharmaceutical-science/quantitative-structure-activity-relationship> - Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) A QSAR model for predictive toxicology is a mathematical relationship between a chemical's quantitative molecular descriptors and its toxicological endpoint

## **6.3. Программное обеспечение и информационно-справочные системы, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое свободно распространяемое и лицензионное ПО, в т.ч. MS Office.

Программное обеспечение для адаптации образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья:

Программа экранного доступа Nvda - программа экранного доступа к системным и офисным приложениям, включая web-браузеры, почтовые клиенты, Интернет-мессенджеры и офисные пакеты. Встроенная поддержка речевого вывода на более чем 80 языках. Поддержка большого числа брайлевских дисплеев, включая возможность автоматического обнаружения многих из них, а также поддержка брайлевского ввода для дисплеев с брайлевской клавиатурой. Чтение элементов управления и текста при использовании жестов сенсорного экрана.

*Перечень программного обеспечения*

*(обновление производится по мере появления новых версий программы)*

1. Linux
2. Quantum Espresso

*Перечень информационно-справочных систем*

*(обновление выполняется еженедельно)*

Не используется.

## **6.4. Специальные помещения, лаборатории и лабораторное оборудование**

Для обеспечения реализации дисциплины используется оборудование общего назначения, специализированное оборудование, оборудование, обеспечивающее адаптацию электронных и печатных образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья, наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий по списку.

Оборудование общего назначения:

Презентационное оборудование (мультимедиа-проектор, экран, компьютер для управления) - для проведения лекционных и семинарских занятий.

Компьютерный класс (с выходом в Internet) - для организации самостоятельной работы обучающихся.

Оборудование, обеспечивающее адаптацию электронных и печатных образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (место размещения - учебно-методический отдел, устанавливается по месту проведения занятий (при необходимости)):

Устройство портативное для увеличения DION OPTIC VISION - предназначено для обучающихся с нарушением зрения с целью увеличения текста и подбора контрастных схем изображения;

Электронный ручной видеоувеличитель Bigger D2.5-43 TV - предназначено для обучающихся с нарушением зрения для увеличения и чтения плоскочечатного текста;

Радиокласс (радиомикрофон) «Сонет-PCM» РМ-6-1 (заушный индиктор) - портативная звуковая FM-система для обучающихся с нарушением слуха, улучшающая восприятие голосовой информации.

Специализированное оборудование:

учебные помещения

"Компьютер ""Некс Оптима "" - 0 шт.

Вольтметр цифровой -1516 - 1 шт.

Генератор ГЗ-102(1981г) - 1 шт.

Микрометр МК 0-25 ММ - 1 шт.

Набор гирь(100,200,300,500г) для лабораторного практикума по механике - 1 шт.

Набор пружин для лабораторного практикума по механике - 1 шт.

Осциллограф С1-67 - 1 шт.

Осциллограф С1-99 - 1 шт.

Осциллограф-мультиметр С1-112 - 1 шт.

Реохорд учебный - 1 шт.

Рефрактометр 454 Б - 1 шт.

Рефрактометр ИРФ-454 - 1 шт.

Стенд исследование регулируемого выпрямителя на тиристорах - 1 шт.

Учебная лабораторная установка-исследование однофазного выпрямителя - 1 шт.

Учебная лабораторная установка-исследование однофазного трансформатора - 1 шт.

Учебная лабораторная установка-исследование сглаживающих фильтров - 1 шт.

"Компьютер ""Некс Оптима "" - 0 шт.

Вольтметр цифровой -1516 - 1 шт.

Генератор ГЗ-102(1981г) - 1 шт.

Микрометр МК 0-25 ММ - 1 шт.

Набор гирь(100,200,300,500г) для лабораторного практикума по механике - 1 шт.

Набор пружин для лабораторного практикума по механике - 1 шт.

Осциллограф С1-67 - 1 шт.

Осциллограф С1-99 - 1 шт.

Осциллограф-мультиметр С1-112 - 1 шт.

Реохорд учебный - 1 шт.

Рефрактометр 454 Б - 1 шт.

Рефрактометр ИРФ-454 - 1 шт.

Стенд исследование регулируемого выпрямителя на тиристорах - 1 шт.

Учебная лабораторная установка-исследование однофазного выпрямителя - 1 шт.  
Учебная лабораторная установка-исследование однофазного трансформатора - 1 шт.  
Учебная лабораторная установка-исследование сглаживающих фильтров - 1 шт.

## 7. Методические указания по освоению дисциплины (модуля)

В ходе реализации учебного процесса по дисциплине проводятся учебные занятия и выполняется самостоятельная работа. По вопросам, возникающим в процессе выполнения самостоятельной работы, проводятся консультации.

Для организации и контроля самостоятельной работы обучающихся, а также проведения консультаций применяются информационно-коммуникационные технологии:

Информирование: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3445>

Консультирование: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3445>

Контроль: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3445>

Размещение учебных материалов: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3445>

Учебно-методическое обеспечение:

Циовкин Ю.Ю. Физические основы дизайна молекул : электронный учебно-методический комплекс / Ю.Ю.Циовкин; ФГБОУ ВО СПХФУ Минздрава России. – Санкт-Петербург, 2021.

– Текст электронный // ЭИОС СПХФУ : [сайт]. – URL: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3445> — Режим доступа: для авторизованных пользователей.

### *Методические указания по формам работы*

#### *Консультации в период теоретического обучения*

Консультации в период теоретического обучения предназначены для разъяснения порядка выполнения самостоятельной работы и ответа на сложные вопросы в изучении дисциплины.

#### *Лекции*

Лекции предназначены для сообщения обучающимся необходимого для изучения дисциплины объема теоретического материала. В рамках лекций преподавателем могут реализовываться следующие интерактивные образовательные технологии: дискуссия, лекция с ошибками, видеоконференция, вебинар.

#### *Практические занятия*

Практические занятия предусматривают применение преподавателем различных интерактивных образовательных технологий и активных форм обучения: дискуссия, деловая игра, круглый стол, мини-конференция. Текущий контроль знаний осуществляется на практических занятиях и проводится в форме:

Протокол практического занятия

Краткая характеристика оценочного средства: средство, позволяющее оценить способность обучающегося самостоятельно выполнять учебные задачи и задания с использованием специализированного оборудования и (или) программного обеспечения, обеспеченную совокупностью теоретических знаний.

Представление оценочного средства в фонде: требования к структуре и содержанию протокола.