

МИНОБРНАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Институт прикладной математики и компьютерных наук

УТВЕРЖДАЮ

Директор института прикладной  
математики и компьютерных наук

А.В. Замятин

2023 г.



Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине  
(Оценочные средства по дисциплине)

**Моделирование межмолекулярных взаимодействий**

по направлению подготовки

**01.04.02 Прикладная математика и информатика**

Направленность (профиль) подготовки:

**Интеллектуальный анализ больших данных**

ОС составил:

д-р физ.-мат. наук, доцент,  
зав. кафедрой оптики и спектроскопии



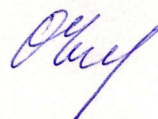
В.Н. Черепанов

д-р хим. наук,  
доцент кафедры оптики и спектроскопии

Р.Р. Валиев

Рецензент:

д-р физ.-мат. наук, доцент,  
профессор кафедры оптики и спектроскопии

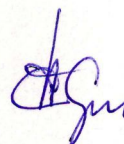


О.Н. Чайковская

Оценочные средства одобрены на заседании учебно-методической комиссии института прикладной математики и компьютерных наук (УМК ИПМКН).

Протокол от 08.06.2023 г. № 2

Председатель УМК ИПМКН,  
д-р техн. наук, профессор



С.П. Сущенко

**Оценочные средства (ОС)** являются элементом системы оценивания сформированности компетенций у обучающихся в целом или на определенном этапе ее формирования.

ОС разрабатывается в соответствии с рабочей программой (РП) дисциплины.

**1. Компетенции и результаты обучения, формируемые в результате освоения дисциплины**

Компетенция	Индикатор компетенции	Код и наименование результатов обучения (планируемые результаты обучения, характеризующие этапы формирования компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
			Отлично	Хорошо	Удовлетворительно	Неудовлетворительно

<p>ПК-4. Способен определять проблемную ситуацию, ставить задачи анализа данных в области профессиональной деятельности, выбирать методы и использовать специализированные знания для её решения.</p>	<p>ИПК-4.1 Определяет проблемную ситуацию и ставит задачу анализа данных в области профессиональной деятельности.</p> <p>ИПК-4.2 Собирает и обрабатывает данные в области профессиональной деятельности, знает и использует специфику таких данных.</p> <p>ИПК-4.3 Выбирает методы анализа данных в области профессиональной деятельности.</p> <p>ИПК-4.4 Разрабатывает концепцию и техническое задание на решение задачи в области профессиональной деятельности на основе анализа данных</p>	<p>ОР-4.1.1: Знать: основные задачи, существующие в настоящее время в физике межмолекулярных взаимодействий, основы математического аппарата, лежащего в основе построения моделей взаимодействия изучаемых атомов и молекул.</p> <p>ОР-4.2.1: Уметь: самостоятельно применять основные принципы и модели межмолекулярных взаимодействий к исследованию молекулярных систем.</p> <p>ОР-4.3.1: Владеть: современными методами моделирования взаимодействий молекул и атомов в физике и химии, включая органические системы.</p>	<p>Имеет сформированное представление об основных задачах, существующих в настоящее время в физике межмолекулярных взаимодействий, об основах математического аппарата, лежащего в основе построения моделей взаимодействия атомов и молекул.</p> <p>Умеет самостоятельно и обоснованно применять основные принципы и модели межмолекулярных взаимодействий к исследованию молекулярных систем.</p> <p>Умеет самостоятельно анализировать структурную и иную биологическую информацию и правильно применять ее в современных</p>	<p>Имеет общее представление об основных задачах, существующих в настоящее время в физике межмолекулярных взаимодействий, об основах математического аппарата, лежащего в основе построения моделей взаимодействия атомов и молекул.</p> <p>Умеет правильно применять основные принципы и методы квантовой теории к исследованию квантовых систем.</p> <p>Умеет анализировать структурную и иную биологическую информацию и правильно применять ее в современных методах моделирования взаимодействия молекул и атомов в</p>	<p>Имеет слабое представление об основных задачах, существующих в настоящее время в физике межмолекулярных взаимодействий, об основах математического аппарата, лежащего в основе построения моделей взаимодействия атомов и молекул.</p> <p>В целом успешное, но не систематическое умение применять основные принципы и модели межмолекулярных взаимодействий к исследованию молекулярных систем.</p> <p>В целом успешное, но не систематическое умение применять</p>	<p>Не имеет представления об основных задачах, существующих в настоящее время в физике межмолекулярных взаимодействий, об основах математического аппарата, лежащего в основе построения моделей взаимодействия атомов и молекул.</p> <p>Не умеет применять основные принципы и модели межмолекулярных взаимодействий к исследованию молекулярных систем.</p> <p>Не умеет методы моделирования взаимодействий молекул и атомов в физике и химии, включая органические системы</p>
---	--	--	--	--	---	---

## 2. Этапы формирования компетенций и виды оценочных средств

№	Этапы формирования компетенций (разделы дисциплины)	Код и наименование результатов обучения	Вид оценочного средства (тесты, задания, кейсы, вопросы и др.)
1.	Раздел 1. Введение в физику межмолекулярного взаимодействия	ОР-4.1.1	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
2.	Раздел 2. Основы теории межмолекулярного взаимодействия	ОР-4.1.1, ОР-4.2.1, ОР-4.3.1	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
3	Раздел 3. Энергия взаимодействия молекул	ОР-4.1.1, ОР-4.2.1, ОР-4.3.1	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
4	Раздел 4. Индукционные дипольные моменты	ОР-4.1.1, ОР-4.2.1, ОР-4.3.1	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
5	Раздел 5. Индукционная, дисперсионная поляризуемость	ОР-4.1.1, ОР-4.2.1, ОР-4.3.1	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
6	Раздел 6. Введение в квантовую вычислительную химию.	ОР-4.1.1, ОР-4.2.1, ОР-4.3.1	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
7	Раздел 7. Методы квантовой химии.	ОР-4.1.1, ОР-4.2.1, ОР-4.3.1	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
8	Раздел 8. Фотофизика и фотохимия	ОР-4.1.1, ОР-4.2.1, ОР-4.3.1	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации

## 3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки образовательных результатов обучения

3.1. Типовые задания для проведения текущего контроля успеваемости по дисциплине.

### **Вопросы, вынесенные на самостоятельное изучение.**

1. Физическая химия. Термодинамические потенциалы.
2. Химические реакции. Энергия активации. Потенциальный барьер.
3. Термохимия. Энергия Гиббса, константы равновесия, константы скоростей химических реакций.
4. Сольватохромные эффекты.

### **Темы для рефератов**

- 1) Химическая кинетика.
- 2) Теория кристаллического поля.
- 3) Моделирование спектров молекул.

3.2. Типовые задания для проведения промежуточной аттестации по дисциплине

### **Перечень вопросов, выносимых на экзамен**

1. Классификация межмолекулярных сил. Короткодействующие и дальнедействующие силы.
2. Понятия электростатической, индукционной и дисперсионной энергий. Эффекты задержки взаимодействия. Магнитные эффекты.

3. Гамильтониан взаимодействия пары молекул.
4. Мультипольные электрические моменты молекул.
5. Связь мультипольных моментов молекулы с индуцированным ей потенциалом, напряженностью поля и его градиентами на взаимодействующей с ней молекулой.
6. Связь электростатической энергии взаимодействия с мультипольными моментами.
7. Энергия молекулы и ее мультипольные моменты во внешнем однородном и неоднородном полях.
8. Поляризуемости и высшие поляризуемости молекул.
9. Определение электрических мультипольных моментов и (высших)поляризуемостей молекул через энергию молекулы во внешнем электрическом поле.
10. Отклик молекулы на гармоническое осциллирующее поле.
11. Комплексные мультипольные моменты и (высшие)поляризуемости.
12. Индукционная энергия и ее связь со статическими молекулярными поляризуемостями.
13. Дисперсионная энергия и ее связь с динамическими поляризуемостями на мнимых частотах.
14. Дипольный момент взаимодействующих молекул.
15. Приближение "constant ratio":CRA1 и CRA2.
16. Поляризуемость взаимодействующих молекул.
17. Гиперполяризуемость взаимодействующих молекул.
18. Методы расчета мультипольных моментов и (высших)поляризуемостей молекул. Численный метод конечных разностей.
19. Уравнение Хартри-Фока.
20. Уравнения Рутаана. Базисные наборы. Молекулярные орбитали.
21. Полуэмпирические методы. Метод Хюккеля.
22. Ароматичность.
23. Электронная корреляция. Методы учета электронной корреляции.
24. Теория функционала плотности.
25. Приближение Борна-Оппенгеймера. Неадиабатические поправки.

#### **4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания образовательных результатов обучения**

4.1. Методические материалы для оценки текущего контроля успеваемости по дисциплине.

Оценка текущего контроля проводится на основе оценки компетенций, соответствующих текущему разделу дисциплины, согласно таблице раздела 1.

4.2. Методические материалы для проведения промежуточной аттестации по дисциплине.

Оценка промежуточной аттестации для дисциплины «Моделирование молекулярных мишеней для медицинской диагностики и терапии» основывается на бальной системе.

Максимальная сумма баллов по дисциплине составляет 100 баллов, из них – 50 баллов по результатам промежуточной аттестации и 50 баллов по результатам итоговой аттестации (зачет, экзамен). Промежуточная аттестация предполагает оценку результатов выполнения практических работ (50 баллов). Соответствие с классической пятибалльной шкалой: 55-69 соответствует оценке «3», 70-89 – «4», 90-100 – «5».