

МИНОБРНАУКИ России
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ
заведующий кафедрой

Биотехнологии, химии и

стандартизации

(наименование кафедры)

М.Г. Сульман

(Ф.И.О. зав. кафедрой)

«__» _____ 20__ г.

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

Промежуточной аттестации в форме зачета

(промежуточной аттестации: экзамен, зачет, курсовая работа или курсовой проект; практики: с
указанием вида и типа практики; государственного итогового экзамена)

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Наименование дисциплины (для промежуточной аттестации)

направление подготовки 04.03.01 Химия

Направленность (профиль) – Медицинская и фармацевтическая химия

Типы задач – научно-исследовательский

Разработаны в соответствии с:

Рабочей программой дисциплины «Компьютерное моделирование лекарственных
препаратов»

утвержденной Проректором по УВР от «__» _____ 20__ г.

Разработчик(и): д.т.н., профессор, Ю.Ю. Косивцов

Тверь 202_

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 1

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Конструирование расчетной ячейки для термодинамических систем.
Расчет термодинамических величин методом молекулярной динамики.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Описать общие подходы теории корреляции структура –
фармакологическая активность (QSAR).**

3. Задание для проверки уровня УМЕТЬ – 0 или 1 балл:

С помощью базы данных программы ACD/ChemSketch постройте
двухцепочечный фрагмент ДНК (Databases/Nucleic Acids – отметить
галочкой пункт **Double Stranded**) со следующей последовательностью
мононуклеотидов: аденин (А) – тимин (Т) – гуанин (Г) – цитозин (Ц) – А –
Г – Ц – Т – А – А – Г – Ц – Т – Ц – А.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 2

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

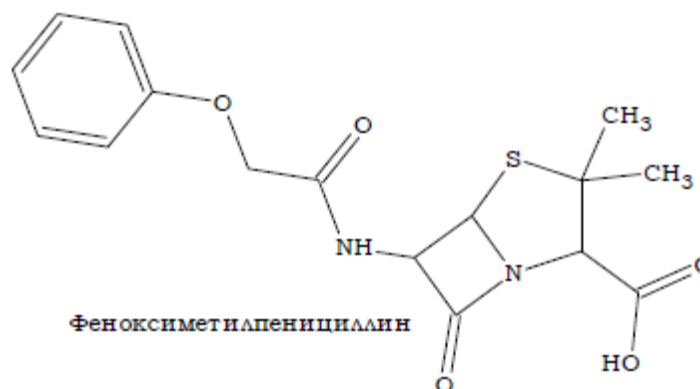
Современные проблемы применения математических методов в химии.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Опишите принципы применения таблиц смежности и матриц связности.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

С помощью программы ACD/ChemSketch построить в рабочей области программы молекулу антибиотика феноксиметилпенициллина. Произвести автонумерацию атомов и определить номера атомов β-лактамного кольца. С помощью программы определить и записать название антибиотика в соответствии с систематической международной номенклатурой ИЮПАК. Вычислить и записать свойства данного вещества.



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 3

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Расчетные методы компьютерной химии.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Опишите принципы кодирования формул в системе VIBIGON.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
С помощью таблицы радикалов программы ACD ChemSketch построить молекулу гексапептида даларгина (тирозил – аланил – глицил – фенилаланил – лейцил – аргинин). Определить возможные таутомерные формы соединения, рассчитать основные характеристики.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 4

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Опишите общие принципы метода молекулярной динамики.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
С помощью программы ACD/ChemSketch вычислить и сравнить с экспериментальными значениями следующие характеристики бензола:
плотность ($\rho = 0,899 \text{ г/см}^3$);
показатель преломления ($n = 1,50$);
электронную поляризуемость молекул ($\alpha_e = 1,27 \cdot 10^{-28} \text{ м}^3$);
диэлектрическую проницаемость ($\epsilon^{20} = 2,27$).

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 5

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

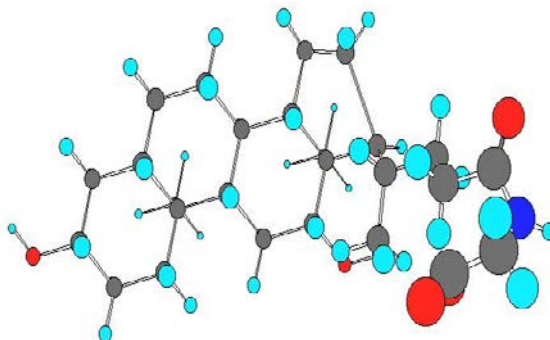
Концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Перечислите виды параметрической идентификации в зависимости от имеющихся представлений.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

С помощью программы ChemDraw смоделировать молекулу гликодезоксихолевой кислоты.



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

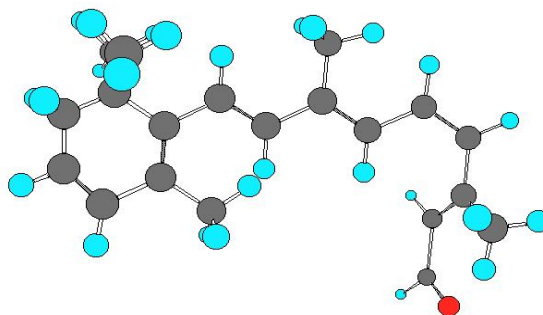
Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 6

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Опишите общие принципы метода Монте-Карло.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
С помощью программы ChemDraw смоделировать молекулу 11-цис-3,4-дегидроретиналя.



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 7

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

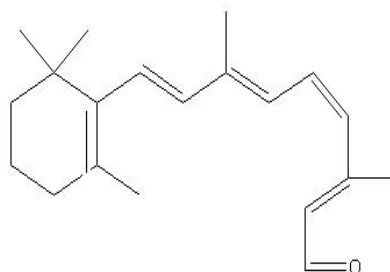
Исследование механизмов протекания реакции: понятия о кинетических расчетах, планирование кинетических экспериментов.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Опишите общие принципы квантовых методов исследования.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

С помощью программы ChemDraw построить структурную формулу 11-цис-ретинала.



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 8

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Опишите метод решения обратной задачи химической кинетики (построение целевых функций).

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

С помощью программы ChemDraw построить структурные формулы α -глюкозы и β -глюкозы.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

О.В. Кислица

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 9

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Изучение термодинамических параметров химических соединений.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Приведите примеры использования экспертных систем в химии.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

С помощью программы HyperChem постройте и рассчитайте структуры, энергии и колебательные частоты для межмолекулярных ассоциатов муравьиной кислоты с метаном, аммиаком и водой. Рассчитайте энергии связи ассоциатов.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

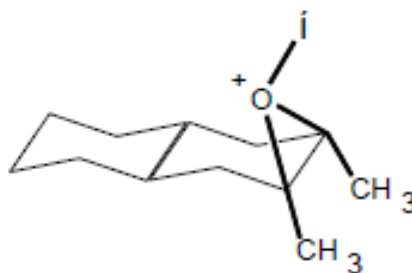
Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 10

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Экспертные системы, фреймы и семантические сети.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Перечислите методы корреляции, основанные на теории распознавания образов.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Используя полуэмпирический метод AM1, исследуйте равновесные структуры протонированных эпоксидов на примере эпоксидекалина с целью объяснения региохимии кислотно-катализируемого раскрытия трехчленного цикла.



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 11

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

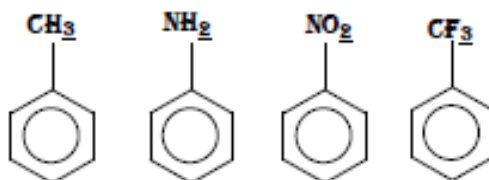
Общие понятия о задаче корреляции структура- свойство и структура-активность.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Опишите синтетический и ретросинтетический подходы к планированию органического синтеза.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

С помощью полуэмпирического метода AM1 определите предпочтительное место атаки катионом нитрония (NO_2^+) молекул толуола, анилина, нитробензола и трифтортолуола.



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 12

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Компьютерное планирование органического синтеза.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
**Перечислите методы корреляции, основанные на регрессионных
зависимостях и квантовых моделях молекул.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
**Используя полуэмпирические и неэмпирические методы, установить
структура димера воды, как пример молекул с водородными связями.
Постройте и оптимизируйте геометрию молекул воды. Задайте
вычисление колебательных частот, запишите вычисленную длину связи
О-Н и колебательные частоты.**

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 13

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

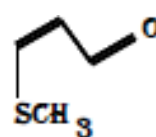
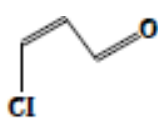
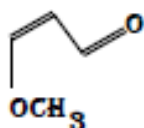
Изучение методов исследования поведения целевой функции при параметрической идентификации.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Опишите формально-логические и эмпирические методы планирования органического синтеза.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

Постройте и оптимизируйте методом AM1 геометрию соединений. Выполните один расчет конфигурационного взаимодействия для каждой молекулы, используя геометрию основного состояния, полученную методом AM1.



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 14

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Построение деревьев синтеза биологически активных веществ с применением синтетического подхода.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Опишите принципы решения прямой задачи химической кинетики.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

Используя программу HyperChem, постройте и оптимизируйте геометрию молекул, необходимых для вычисления энергии первого и второго гидрирования фурана.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 15

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Конструирование расчетной ячейки для термодинамических систем.
Расчет термодинамических величин методом молекулярной динамики.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Опишите принципы математического моделирования химико-
технологических процессов.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» - 0 или 1 балл:

**Используя полуэмпирический метод AM1, предсказать место
протонирования в формамиде, ацетамиде и N,N-диметилформамиде в
газовой фазе.**

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 16

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул.
2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Опишите принципы компьютерного кодирования химических соединений.
3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Используя программу HyperChem, постройте и оптимизируйте геометрию молекул, необходимых для вычисления энергии первого и второго гидрирования тиофена.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 17

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

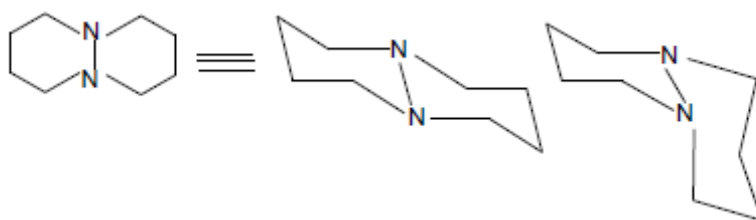
Тенденции развития вычислительной техники и ее применения для физико-химических исследований.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Опишите принцип использования метода инкрементов для расчета термодинамических параметров молекул.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

Постройте структуры конформационных изомеров гидразина и проведите оптимизацию геометрии, используя метод РМЗ. Какая из структур согласно расчетам оказалась энергетически более стабильной?



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 18

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры.
2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Опишите общие принципы метода молекулярной динамики.
3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Используя программу HyperChem, постройте и оптимизируйте геометрию молекул, необходимых для вычисления энергии первого и второго гидрирования бензола.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 19

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

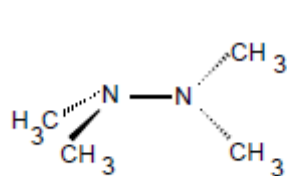
Обратная задача химической кинетики (виды параметрической идентификации в зависимости от имеющихся представлений).

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

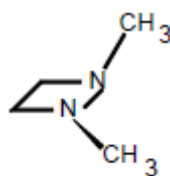
Опишите методы решения прямой задачи химической кинетики.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

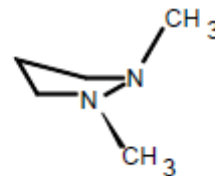
Постройте и оптимизируйте методом РМЗ следующие молекулы гидразинов:



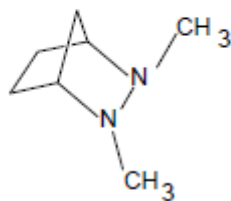
1



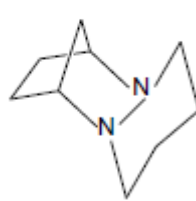
2



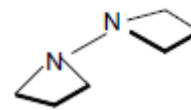
3



4



5



6

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Семестр 8

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 20

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Опишите методы корреляции, основанные на теории распознавания образов.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» - 0 или 1 балл:

Используя программу HyperChem, постройте и оптимизируйте геометрию молекул, необходимых для вычисления энергии первого и второго гидрирования пиррола.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман