

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета
_____ А.С. Князев

«*августа*» 20 *22* г.

Рабочая программа дисциплины

Молекулярное моделирование

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2022

Код дисциплины в учебном плане: Б1.О.В.ДВ.07.16

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

_____ А.С. Князев

Председатель УМК

_____ В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности;

– ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук;

– ПК-3. Способен к решению профессиональных производственных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-3.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля;

ИОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности;

ИОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием;

ИПК-1.3. Использует современное физико-химическое оборудование для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук, применяя взаимодополняющие методы исследования

ИПК-3.2. Производит оценку применимости стандартных и/или предложенных в результате НИР технологических решений на применимость с учетом специфики изучаемых процессов.

2. Задачи освоения дисциплины

– подготовить магистрантов к научно-исследовательской деятельности, связанной с моделированием с использованием методов силовых полей молекул, в том числе биомолекул, а также сложных молекулярных систем: комплексов, растворов, поверхностей раздела фаз;

– обеспечить развитие навыков, направленных на формирование модельных представление молекулярного объекта и возможности организации вычислительных молекулярно-динамических экспериментов с ним;

– освоить методы проведения расчетов для модельных молекулярных систем с использованием различных программных средств, а также проводить обработку результатов молекулярно-динамических расчетов.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в модуль Дисциплины (модули) по выбору 7(ДВ.7).

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 3, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: «Квантовая химия», «Физическая химия», «Органическая

химия», «Строение вещества», полученные в рамках обучения по программе бакалавриата или специалитета.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

– лекции: 12 ч.;

– практические занятия: 20 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Введение в дисциплину

Введение в дисциплину. Предмет курса. Основные понятия молекулярного моделирования. Единицы измерения в «молекулярном мире». Характерные единицы массы, энергии, времени. Число частиц в моделируемой молекулярной системе. Этапы развития молекулярного моделирования. Области применения молекулярного моделирования.

Тема 2. Силовые поля

Основные представления о силовых полях. Силовое поле AMBER. Функциональный вид взаимодействий. Невалентные взаимодействия: ван-дер-ваальсовы и кулоновские силы. Выбор атомных зарядов. Основы работы с пакетами программ моделирования методами молекулярной механики.

Тема 3. Минимизация потенциальной энергии

Понятие о поверхности потенциальной энергии. Минимум, переходное состояние и интермедиа. Гессиант и его использование для характеристики точек. Глобальная и локальная минимизация геометрии. Алгоритмы локальной минимизации. Понятие о порядке минимизатора. Минимизаторы нулевого, первого и второго порядка. Метод симплексов и биекций. Метод следования градиенту, метод сопряженных градиентов. Метод Ньютона и Ньютона-Рафсона. Алгоритмы глобальной минимизации геометрии. Оптимизация геометрии молекулы.

Тема 4. Основы статистической термодинамики

Основные положения статистической термодинамики, их применение в молекулярном моделировании. Метод конформационного анализа Монте-Карло. Броуновская динамика. Оптимизация геометрии молекулы методом Монте-Карло.

Тема 5. Молекулярная динамика

Динамика молекулярных систем. Уравнения движения: Ньютона, Лагранжа, Гамильтона. Молекулярная динамика. Численное интегрирование уравнений движения. Алгоритм Верле (простейшая разностная аппроксимация). Алгоритм с перескоками (Leap-frog алгоритм). Скоростной алгоритм Верле. Проведение моделирования методом молекулярной динамики.

Тема 6. Особые условия в молекулярном моделировании

Ограничения, налагаемые на расчеты молекулярного моделирования для уменьшения сложности системы, а также для учета особых свойств системы: растворитель, протяженность, термодинамические характеристики. Представление растворителя.

Тема 7. Применение молекулярного моделирования

Применение молекулярного моделирования к моделированию биологических макромолекул, наноструктур, молекул в растворе. Использование молекулярного моделирования в генерировании структуры белков.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости и оценивания отчетов по выполненным практическим работам, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр. При выполнении всех практических заданий студент допускается к сдаче зачета.

Пример вопросов к заданию для практической работы:

1. Какой из исходных конформер наиболее устойчив? В каком порядке изменяется стабильность конформеров?
2. Какой из конечных конформеров наиболее устойчив? В каком порядке изменяется стабильность полученных конформеров?
3. Сильно ли изменяется геометрия при оптимизации?
4. Можно ли сделать вывод относительно того, как зависит энергия от величин углов и гош-транс ориентации групп в конформерах?

Пример вопросов для текущего контроля по лекционному материалу:

1. Дать схематическое описание постановки и проведения молекулярно-динамического вычислительного эксперимента;
2. Дать определение расчетной ячейки с периодическими граничными условиями. Аргументируйте полезность введения периодических граничных условий при моделировании конденсированного состояния вещества;
3. В чем состоит идея метода Верле (метода составления списков), позволяющая значительно сократить количество вычислений при вычислении невалентных взаимодействий? Привести оценки числа вычислений на одном временном шаге и требуемой памяти при вычислении невалентных взаимодействий. Указать недостатки метода.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет по курсу «Молекулярное моделирование» проводится в форме устного опроса студентов, проверяющего освоение компетенций ИОПК-3.1., ИОПК-3.2., ИОПК-3.3., ИПК-1.1., ИПК-3.2.

Результаты зачета определяются оценками «зачтено» или «не зачтено».

Примерные вопросы для зачета:

1. Молекулярная динамика, ее механические и идейные основы;
2. Физическая природа потенциалов молекулярных взаимодействий и их функциональный вид;
3. Уравнения движения молекулярной системы. Их разностная аппроксимация;
4. Моделирование динамики конденсированных систем. Типы ансамблей. Периодические граничные условия;
5. Алгоритм Верле (составление списка соседей) для вычисления невалентных взаимодействий;
6. Температура. Способы оценки и вычисления. Термостатирование молекулярной системы;
7. Учет растворителя. Явный и неявный учет растворителя;
8. Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена;
9. Моделирование биологических макромолекул. Основы подхода. Назначение моделирования;
10. Общая схема молекулярно-динамического вычислительного эксперимента;
11. Обработка траекторий молекулярной динамики. Временные и пространственные автокорреляционные функции.

11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
- б) План практических занятий по дисциплине.
- в) Методические указания по проведению практических занятий.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
 - Ибрагимов И. М., Назаров Ю. Ф., Ковшов А. Н. Основы компьютерного моделирования наносистем. Москва Лань, 2010. 376 с.
 - Уилсон К., Уолкер Дж. Принципы и методы биохимии и молекулярной биологии. Бином. Лаборатория знаний. 2013. – 848 с.
 - Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие для вузов 3-е изд. / В.Г. Цирельсон. – М. : Издательство «БИНОМ. Лаборатория знаний», 2014. – 495 с.
 - Полещук О.Х. Химические исследования методами расчета электронной структуры молекул : учебное пособие / О.Х. Полещук, Д.М. Кижнер. – Томск : Издательство ТПУ, 2006. – 146 с.
 - Цышевский Р.В. Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций : учебно-методическое пособие / Р.В. Цышевский, Г.Г. Гарифзянова, Г.М. Храпковский. – Казань : Издательство КНИТУ, 2012. – 87 с.

б) дополнительная литература:

- Ермаков А.И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. : учебник и практикум для вузов / А.И. Ермаков. – М. : Издательство Юрайт, 2020. – 585 с.
- Соловьев М.Е. Компьютерная химия / – М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. – М. : ООО «СОЛОН-ПРЕСС», 2005. – 536 с.
- Ансельм А. И. Основы статистической физики и термодинамики: учеб. пособие. Москва Лань, 2007. – 423 с.

в) ресурсы сети Интернет:

- Научный журнал «Journal of Chemical information and modeling» – <https://pubs.acs.org/journal/jcisd8>
- Научный журнал «Molecular informatics» – <https://onlinelibrary.wiley.com/journal/18681751>
- Электронный учебный курс «Everything you need to get started in medical billing & coding» – <https://www.medicalbillingandcoding.org/what-is-mbac/>

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
 - Microsoft Office Standard 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
 - публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).
- б) информационные справочные системы:
 - Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
 - Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
 - ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
 - ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
 - Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>
- Поисковая система по научным публикациям «Google Scholar» – <https://scholar.google.com/>
- в) профессиональные базы данных:
 - База данных «Protein Data Bank» – <http://www.rcsb.org>
 - Спектральная база данных органических соединений «SDBS» – https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre_index.cgi
 - База данных по рассчитанной квантово-химическими методами геометрии соединений «Computational Chemistry Comparison and Benchmark» – <https://cccbdb.nist.gov/geom1x.asp>
 - База данных «Термические Константы Веществ» – <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html/welcome.html>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешанном формате («Актру»).

15. Информация о разработчиках

Хлебников Андрей Иванович, д-р. хим. наук, профессор. Кафедра природных соединений, фармацевтической и медицинской химии Национального исследовательского Томского государственного университета, профессор.

Курзина Ирина Александровна, д-р физ.-мат. наук, доцент, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, профессор.