

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Молекулярное моделирование

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Физическая химия

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Молекулярное моделирование**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p>ОПК-1.С. Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p>Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p>
<p>СПК-1.С. Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач</p>	<p>Знать: теоретические основы современных методов молекулярного моделирования Уметь: выбирать метод молекулярного моделирования, адекватный поставленной задаче Уметь: оценить возможные источники ошибок при изучении систем различной природы с помощью методов молекулярного моделирования (описание систем квантово-химическими методами, классическими силовыми полями, комбинированными методами и пр.) Уметь: применить теоретические основы современных физико-химических методов при анализе и представлении материала научного сообщения на заданную тему Владеть: навыками статистической обработки данных вычислительного эксперимента</p>
<p>СПК-4.С. Способность использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области физической химии</p>	<p>Знать: возможности и ограничения расчетных методов при решении практических задач Владеть: навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов интернета; основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации при решении задач молекулярного моделирования</p>
<p>СПК-5.С. Способность проводить квантовохимические, термодинамические</p>	<p>Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических, молекулярно-механических и комбинированных расчётов</p>

и кинетические расчеты с использованием современных программных комплексов и баз данных	Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для молекулярного моделирования систем разной природы
---	--

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 32 часа составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен:

Знать: базовый материал курсов математического анализа, линейной алгебры, физической химии, в том числе статистической термодинамики и квантовой теории строения молекул.

Уметь: формировать математическую модель химических процессов на основе основных законов физической химии, применять подход статистической термодинамики к созданию модели и интерпретации результатов вычислений.

Владеть: базовыми навыками работы с ПК, основами программирования и поиска научной и учебной информации в интернет-источниках

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Самостоятельная работа обучающегося, часы из них

аттестации по дисциплине (модулю)		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Введение в молекулярное моделирование.	8	2	2				4			4
Тема 2. Моделирование статистических ансамблей в молекулярной динамике и в методе Монте Карло.	8	2	2				4			4
Тема 3. Расчёт термодинамических величин в молекулярной динамике.	8	2	2				4			4
Тема 4. Молекулярная механика. Силовые поля.	8	2	2				4			4
Тема 5. Молекулярная динамика. Численное решение уравнений движения.	10	4	2				6			4
Тема 6. Динамика сложных систем.	10	2	4				6			4
Тема 7. Методы анализа	8	2	2				4			4

молекулярно-динамических траекторий.										
Тема 8. Современные компьютерные алгоритмы реализации молекулярной динамики.	10	2	2	2			6			4
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	2					2	2			
Итого	72	18	18	2		2	40			32

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Е.Д. Коц. Конспекты лекций по молекулярному моделированию (на сервере компьютерного класса).

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

[Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия](#) М.: 2009

Дополнительная литература

1. Хельтзе Х. Д. Молекулярное моделирование. Теория и практика. М.: 2013.
2. Уилсон К., Уолкер Дж. Принципы и методы биохимии и молекулярной биологии. М.: 2009.
3. Френкель Д., Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям. М.: 2013.

4. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов. М.: 2014

12. Язык преподавания: русский

13. Преподаватели:

1. профессор, д.х.н., Немухин Александр Владимирович, кафедра физической химии химического факультета МГУ, anem@lcc.chem.msu.ru, 8-495-939-48-40
2. м.н.с. Кулакова Анна Михайловна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, kulakova@lcc.chem.msu.ru, 8-495-939-48-40
3. н.с. к.ф.-м.н. Коц Екатерина Дмитриевна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, kots.katya@lcc.chem.msu.ru, 8-495-939-48-40

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Вопросы для зачета:

1. Предмет компьютерной химии. Объекты и методы.
2. Различные модели компьютерной химии, используемые при расчётах энергии, структуры и физико-химических свойств изучаемых систем
3. Основные особенности методов молекулярной динамики, объекты изучения, ограничения метода.
4. Монте Карло в каноническом, микроканоническом, изобарно-изотермическом и изохорно-изотермическом ансамблях.
5. Молекулярная динамика при постоянной температуре. Термостатирование.
6. Молекулярная динамика при постоянном давлении. Наиболее популярные баростаты.
7. Кинетическая и внутренняя энергии. Флуктуации
8. Расчёт текущих температуры и давления
9. Расчёт теплоёмкости C_v и энтальпии.
10. Классическое представление молекул в механике Ньютона. Разложение потенциальной энергии.
11. Параметры силовых полей.
12. Общий алгоритм разработки и оптимизации, силовых полей. Параметризация белковых молекул
13. Наиболее популярные силовые поля биологических и органических молекул.
14. Приближение Борна-Оппенгеймера. Надежность классического описания. Детерминистская схема.

15. Разностный алгоритм Верле, расчёт скорости. Скоростной алгоритм Верле, алгоритм leap-frog.
16. Расчёт сил из потенциалов.
17. Моделирование в периодических пограничных условиях.
18. Методы расчёта нековалентных взаимодействий при периодических граничных условиях.
19. Суммирование Эвальда, мультипольный метод (Fast Multiple Method).
20. Способы контроля за достижением равновесия. Визуальное представление молекулярно-динамических траекторий.
21. Расчёт изменения термодинамических величин по молекулярно-динамической траектории.
22. Среднеквадратичное отклонение. Автокорреляционный анализ.
23. Расчёт статистической ошибки.
24. Импульсный скоростной алгоритм Верле с использованием различных шагов интегрирования. Недостатки импульсного метода. Ограничения, накладываемые на шаг интегрирования.
25. Пространственное разбиение системы для последующей параллелизации. Основной принцип осуществления параллельного расчёта. Эффективное соотношение числа атомов на один процессор.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности неприципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
--	-------------------------

<p>Знать: теоретические основы современных методов молекулярного моделирования; возможности и ограничения расчетных методов при решении практических задач.</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы; Уметь: самостоятельно составлять план исследования; Уметь: выбирать метод молекулярного моделирования, адекватный поставленной задаче; Уметь: оценить возможные источники ошибок при изучении систем различной природы с помощью методов молекулярного моделирования (описание систем квантово-химическими методами, классическими силовыми полями, комбинированными методами и пр.); Уметь: применить теоретические основы современных физико-химических методов при анализе и представлении материала научного сообщения на заданную тему; Уметь: грамотно спланировать вычислительный эксперимент; Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических, молекулярно-механических и комбинированных расчётов.</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения; Владеть: навыками проведения расчетов современными методами молекулярного моделирования для определения физико-химических свойств веществ; Владеть: навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов интернета; основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации при решении задач молекулярного моделирования; Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для молекулярного моделирования систем разной природы.</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>