

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)

Квантовая химия биомолекул

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) **Квантовая химия биомолекул**
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: основы теории колебаний молекулы в рамках классической теории малых колебаний и квантовохимической теории строения молекул Знать: подходы и принципы, используемые для построения аппарата современных квантово-химических методов исследования основного и низших возбужденных электронных состояний биомолекул, относительные преимущества и недостатки существующих Владеть: навыками самостоятельного получения знаний в области теории функционала плотности и молекулярного моделирования биосистем</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 квантовой химии при решении практических задач Знать: основные базы данных, используемые в практике научных исследований квантовохимической направленности Знать: методологию поиска информации в открытых источниках и специализированных базах данных</p>
<p>СПК-5.С. Способность проводить</p>	<p>Уметь: применять современные методы компьютерного моделирования для расчета,</p>

квантовохимические, термодинамические и кинетические расчеты с использованием современных программных комплексов и баз данных	интерпретации и предсказания строения и физико-химических свойств молекулярных систем Уметь: формировать системы базовых уравнений методов, представленных в спецкурсе, строить их расчётные схемы, выбирать метод исследования электронных состояний рассматриваемой молекулы, ресурсы которого позволяют учесть особенности структуры этих состояний Владеть: навыками поиска данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применения их при решении практических химических задач
---	---

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: основы квантовой химии и строения молекул; основные принципы молекулярного моделирования. Знать подходы и принципы, используемые для построения аппарата современных квантово-химических методов исследования электронных состояний малых молекул

Уметь: работать с информационными базами данных, основам работы с программным обеспечением. Применять современные методы компьютерного моделирования.

Владеть: навыками поиска данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применения их при решении практических химических задач

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

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

форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)		из них					часы			
		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. Биосистемы. Методы расчета больших молекул и вычислительная сложность. Необходимость гибридных подходов. Квантовая подсистема в макромолекуле, популярные подходы к ее описанию.	8	2	2				4	4		4
Тема 2. Теория функционала плотности. Теорема Хоенберга-Кона. Обменно-корреляционный функционал.	8	2	2				4	4		4
Тема 3. Подход Кона-Шэма. Представление кинетической и потенциальной энергии через орбитали Кона-Шэма.	8	2	2				4	4		4

Тема 4. Классы обменно-корреляционных функционалов. Приближение локальной плотности. Гибридные функционалы плотности: B3LYP, PBE0. Соотношение для локального и фоковского вклада в обменную энергию.	8	2	2				4	4		4
Тема 5. Коррекция асимптотики функционалов плотности. Long range correction; LC-BLYP, LC-BPBE, CAMB3LYP. Дисперсионные взаимодействия, методы DFT-D.	8	2	2				4	4		4
Тема 6. Нестационарная теория DFT(TD-DFT). Оценки энергий возбужденных состояний.	8	2	2	2			6	2		2
Тема 7. Подходы DFTB. Приближение tight-binding (TB), подбор параметров гамильтониана под описание двухатомных фрагментов.	8	2	2				4	4		4
Тема 8. Модели растворителя: континуальные и дискретные подходы. Модель Онзагера (SCRF), PCM, COSMO. Параметризация методов.	8	2	2				4	4		4

Тема 9. Дискретные модели растворителя. Подход EFP.	6	2	2				4	2		2
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			
Итого	72	18	18	2		2	40	32		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):

Пакет презентаций по каждому разделу курса

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Фларри Р. Квантовая химия, М.: "Мир". 1985
2. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов на/Д: "Феникс" 1997.
3. [Цюлике, Л.](#) Квантовая химия, М.: Мир.1976.

Дополнительная литература

1. Пупышев В.И. Дополнительные главы квантовой механики молекул. Введение в теорию ССП. Части I-III. М.: "МГУ", 2008
2. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по теории строения молекул. Ростов-Дон: "Феникс" 1997.
3. Wolfram Koch, Max C. Holthausen A Chemist's Guide to Density Functional Theory Wiley-VCH Verlag GmbH 2001.

Программное обеспечение и Интернет ресурсы

1. GAMESS-US webpage: <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/>

2. Granovsky A.A., Firefly version 8. <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>
3. Сетевая библиотечка базисов <https://bse.pnl.gov/bse/portal>.
4. База данных NIST <http://webbook.nist.gov/chemistry/form-ser.html>
5. База расчетных данных NIST <http://cccbdb.nist.gov/exp1.asp>
6. Визуализатор ChemCraftLite <http://www.chemcraftprog.com/>

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

Доцент, к.х.н., Ермилов Александр Юрьевич, кафедра физической химии химического факультета МГУ, sanchik-u@yandex.ru, 8-495-939-22-86

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. Рассчитайте оптимальную геометрию и частоты колебаний молекулы этилена в рамках теории функционала плотности с функционалом B3LYP, используя базис cc-pvdz. Сравните результаты расчета с экспериментом (NIST). Как изменится погрешность расчетов при использовании базиса cc-pvtz?
2. Рассчитайте оптимальную геометрию и частоты колебаний молекулы муравьиной кислоты (HCOOH) методом функционала плотности с функционалом B3LYP, используя базис cc-pvtz. Сравните результаты расчета с экспериментом (NIST).
3. Методом функционала плотности рассчитайте оптимальную геометрию молекулы анилина (C₆H₅NH₂) с функционалами различных классов (LSDA, PBE, B3LYP), используя базис cc-pvdz. Какой из вариантов расчета прогнозирует плоское строение молекулы?
4. Рассчитайте оптимальную геометрию молекулы бензола (C₆H₆) методом функционала плотности с функционалами LSDA, PBE, B3LYP, используя базис cc-pvdz. Сравните результаты расчета с базой расчетных данных NIST. Какой функционал дает наилучшее описание структуры молекулы?
5. Методом функционала плотности рассчитайте оптимальную геометрию молекулы глицина с функционалами различных классов (LSDA, PBE, B3LYP), используя базис cc-pvdz.
6. Методом DFT рассчитайте равновесную конфигурацию молекулы этилена с использованием функционалов разных классов. Какой

- из функционалов дают наилучшее описание геометрических параметров молекулы?
7. Рассчитайте равновесную конфигурацию молекулы бензола с использованием функционалов разных классов. Какой из функционалов дают наилучшее описание геометрических параметров молекулы?
 8. Рассчитайте равновесную конфигурацию молекулы уксусной кислоты с использованием функционалов разных классов. Какой из функционалов дают наилучшее описание геометрических параметров молекулы?
 9. Вычислите энергию связывания в димере аммиака ($\text{NH}_3\cdots\text{NH}_3$) с использованием функционалов разных классов. Какой из функционалов дают наилучшее описание водородной связи? Сравните результаты расчета с базой расчетных данных NIST.
 10. Рассчитайте потенциальную кривую (достаточно 2-3 точки + «очень большое расстояние», диссоциационный предел) молекулы водорода (базис sto-3g и cc-pvtz) с использованием различных обменно-корреляционных функционалов (LDA, LSDA, PBE, B3LYP, PW91, M06-2X(meta-GGA)).
 11. Рассчитайте потенциальную кривую (достаточно 2-3 точки + «очень большое расстояние», диссоциационный предел) молекулярного иона водорода H_2^+ (базис sto-3g и cc-pvtz) с использованием различных обменно-корреляционных функционалов (LDA, LSDA, PBE, B3LYP, PW91, M06-2X(meta-GGA)). Почему в одноэлектронной системе энергия межэлектронного взаимодействия не равна нулю?
 12. Рассчитать потенциальную кривую молекулы CO (базис cc-pvtz) с использованием различных обменно-корреляционных функционалов (LDA, LSDA, PBE, B3LYP, PW91, M06-2X(meta-GGA)). Какой из функционалов дают наилучшее значение длины связи?
 13. Методом функционала плотности рассчитайте оптимальную геометрию молекула анилина с использованием «range separated» функционалов LC-BLYP и CAMB3LYP. Сравните с результатами расчетов для гибридных функционалов PBE0 и B3LYP.
 14. Методом функционала плотности рассчитайте оптимальную геометрию молекул глицина и этилена с использованием «range separated» функционалов LC-BLYP и CAMB3LYP. Сравните с результатами расчетов для гибридных функционалов PBE0 и B3LYP.
 15. Методом функционала плотности в варианте DFT-D рассчитайте оптимальную геометрию комплекса $\text{Ag}\cdots\text{C}_6\text{H}_6$ с использованием функционалов PBE-D и B3LYP-D. Как учет дисперсионных поправок влияет на расчет структуры слабосвязанных комплексов? Сравните с результатами расчетов для исходных функционалов PBE и B3LYP.
 16. Методом TDDFT рассчитайте энергию первого возбужденного состояния молекул формальдегида и этилена. Используйте функционалы PBE0 и B3LYP.
 17. Методом TDDFT оцените энергию первого возбужденного состояния молекул формальдегида и этилена. Используйте функционалы PBE и BLYP.
 18. Методом TDDFT рассчитайте энергию первого возбужденного состояния молекулы анилина. Используйте функционалы PBE0 и B3LYP.

19. В рамках подхода DFTB рассчитайте структуру молекул бензола и бутадиена. Покажите, что геометрия молекул хорошо воспроизводится в рамках моделей tight-binding (TB).
20. В рамках подхода DFTB рассчитайте структуру молекул анилина и глицина. Продемонстрируйте, что геометрия молекул хорошо воспроизводится в рамках модели tight-binding (TB).
21. В приближении DFTB рассчитайте структуру молекулы монометилфосфата. Покажите, что геометрия молекулы хорошо воспроизводится в рамках приближения tight-binding.
22. В приближении DFTB рассчитайте структуру молекулы диметилфосфата. Покажите, что геометрия молекулы хорошо воспроизводится в рамках приближения tight-binding.
23. Рассчитайте равновесную структуру молекулы глицина в водном растворе в рамках модели SCRF. Как изменяется геометрия по сравнению с расчетом изолированной молекулы? Оцените энергию сольватации молекулы.
24. Рассчитайте равновесную структуру молекулы анилина в водном растворе в рамках модели SCRF. Как изменяется геометрия по сравнению с расчетом изолированной молекулы? Оцените энергию сольватации молекулы.
25. Рассчитайте равновесную структуру молекулы глицина в водном растворе в рамках модели PCM. Как изменяется геометрия по сравнению с расчетом изолированной молекулы? Оцените энергию сольватации молекулы.
26. Рассчитайте равновесную структуру молекулы глицина в водном растворе, моделируя сольватную оболочку в приближении EFP. Рассмотрите вариант окружения одной и двумя координатными сферами. Как изменяется геометрия по сравнению с расчетом изолированной молекулы? Оцените энергию сольватации молекулы.
27. Рассчитайте равновесную структуру молекулы анилина в водном растворе, моделируя сольватную оболочку в приближении EFP. Рассмотрите вариант окружения одной и двумя координатными сферами. Как изменяется геометрия по сравнению с расчетом изолированной молекулы? Оцените энергию сольватации молекулы.
28. Рассчитайте равновесную структуру молекулы фенола в водном растворе, моделируя сольватную оболочку в приближении EFP. Рассмотрите вариант окружения одной и двумя координатными сферами. Как изменяется геометрия по сравнению с расчетом изолированной молекулы? Оцените энергию сольватации молекулы.
29. Рассчитайте равновесную структуру молекулы формальдегида в водном растворе, моделируя сольватную оболочку в приближении EFP. Рассмотрите вариант окружения одной и двумя координатными сферами. Как изменяется геометрия по сравнению с расчетом изолированной молекулы? Оцените энергию сольватации молекулы.

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: основы теории колебаний молекулы в рамках классической теории малых колебаний и квантовохимической теории строения молекул</p> <p>Знать: подходы и принципы, используемые для построения аппарата современных квантово-химических методов исследования основного и низших возбужденных электронных состояний биомолекул, относительные преимущества и недостатки существующих</p> <p>Знать: возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач</p> <p>Знать: основные базы данных, используемые в практике научных исследований квантовохимической направленности</p> <p>Знать: методологию поиска информации в открытых источниках и специализированных базах данных</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,</p> <p>Уметь: самостоятельно составлять план исследования</p> <p>Уметь: применять современные методы компьютерного моделирования для расчета, интерпретации и предсказания строения и физико-химических свойств молекулярных систем,</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>

<p>Уметь: формировать системы базовых уравнений методов, представленных в спецкурсе, строить их расчётные схемы, выбирать метод исследования электронных состояний рассматриваемой молекулы, ресурсы которого позволяют учесть особенности структуры этих состояний</p>	
<p>Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p> <p>Владеть: навыками самостоятельного получения знаний в области теории функционала плотности и молекулярного моделирования биосистем</p> <p>Владеть: навыками поиска данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применения их при решении практических химических задач</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>