

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по образовательной деятельности КФУ
Проф. Д.А. Таюрский



01 » июня 2021 г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Компьютерное моделирование молекулярных систем

Направление подготовки: 03.03.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика живых систем

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2021

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и): доцент, к.н. Савостина Л.И. (Кафедра физики молекулярных систем, Отделение физики), Liudmila.Savostina@kpfu.ru ; доцент, к.н. Юльметов А.Р. (кафедра медицинской физики, Отделение физики), Ajdag.Julmetov@kpfu.ru ; Аминова Роза Мухаметовна ; Аминова Роза Мухаметовна

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

| Шифр компетенции | Расшифровка приобретаемой компетенции |
|------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ПК-1 | способность проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта |

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основы квантовохимических методов вычисления пространственной структуры и свойств молекул в газовой фазе;
 - основы методов расчета физико-химических свойств молекулярных систем в газовой фазе с использованием полуэмпирических и неэмпирических методов квантовой химии, а также в рамках теории функционала плотности;
 - знать методы и подходы, позволяющие анализировать и давать теоретическую интерпретацию наблюдаемым в эксперименте оптическим и магнитно-резонансным параметрам.
 - основные принципы молекулярно-динамического моделирования;
 - природу межатомных взаимодействий, потенциалы межатомного взаимодействия;
- методы интегрирования уравнений движения.

Должен уметь:

- применять квантовохимические методы для моделирования структуры молекулярных систем;
- использовать квантовохимические методы для расчетов физико-химических свойств молекул;
- реализовывать различные алгоритмы численного интегрирования уравнений движения;
- интерпретировать результаты молекулярно-динамического моделирования.

Должен владеть:

- практическими навыками в области построения структуры молекулы в газовой фазе;
- навыками расчетов структурных, термодинамических, физико-химических характеристик молекул, уметь интерпретировать полученные (рассчитанные) данные в ЯМР спектроскопии, в оптической и молекулярной спектроскопии;
- методами численного расчета геометрических и энергетических характеристик биомолекул;
- владеть навыками работы с компьютером как средством управления информацией;
- владеть навыками работы с учебной и научной литературой.

Должен демонстрировать способность и готовность:

к решению задач, связанных с атомно-молекулярным строением вещества, работать с современными образовательными и информационными технологиями.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.07.01 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 03.03.02 "Физика (Физика живых систем)" и относится к дисциплинам по выбору части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 4 курсе в 7, 8 семестрах.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 зачетных(ые) единиц(ы) на 288 часа(ов).

Контактная работа - 172 часа(ов), в том числе лекции - 66 часа(ов), практические занятия - 106 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 80 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 36 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 7 семестре; экзамен в 8 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

| N | Разделы дисциплины / модуля | Се-местр | Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах) | | | | | | Само-стоя-тель-ная ра-бота |
|-----|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|----------------------------------------------------------|--------------------|------------------------------|---------------------------|-----------------------------|---------------------------|----------------------------|
| | | | Лекции, всего | Лекции в эл. форме | Практи-ческие занятия, всего | Практи-ческие в эл. форме | Лабора-торные работы, всего | Лабора-торные в эл. форме | |
| 1. | Тема 1. Введение в курс компьютерного моделирования молекулярных систем. Основные понятия квантовой механики и квантовой химии. | 7 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| 2. | Тема 2. Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. | 7 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| 3. | Тема 3. Многоэлектронные атомы. Термы. Вариационный принцип. Теория возмущения | 7 | 2 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | 3 |
| 4. | Тема 4. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей. | 7 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| 5. | Тема 5. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока. Молекулы с замкнутыми и открытыми оболочками. | 7 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| 6. | Тема 6. Свойства молекулярных систем. | 7 | 3 | 0 | 10 | 0 | 0 | 0 | |
| 7. | Тема 7. Метод Хюккеля. Понятие электронной корреляции. Методы учета электронной корреляции. | 7 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| 8. | Тема 8. Понятие базиса в квантовой химии. Типы базисных наборов. | 7 | 2 | 0 | 10 | 0 | 0 | 0 | 17 |
| 9. | Тема 9. Поверхности потенциальной энергии. | 7 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| 10. | Тема 10. Методы оптимизации. Поиск переходного состояния/ | 7 | 3 | 0 | 10 | 0 | 0 | 0 | |
| 11. | Тема 11. Полуэмпирические методы. | 7 | 1 | 0 | 10 | 0 | 0 | 0 | 17 |
| 12. | Тема 12. Программное обеспечение квантовохимических расчетов. | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| 13. | Тема 13. Метод функционала плотности (DFT). | 7 | 6 | 0 | 10 | 0 | 0 | 0 | 17 |
| 14. | Тема 14. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий. | 7 | 2 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | |
| 15. | Тема 15. Основы молекулярно-динамического моделирования Межатомные взаимодействия. | 8 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |

| N | Разделы дисциплины / модуля | Се- местр | Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах) | | | | | | Само- стоя- тель- ная ра- бота |
|-----|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|-------------------------------------------------------------|--------------------------|----------------------------------------|-------------------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|-----------------------------------------------|
| | | | Лекции, всего | Лекции в эл. форме | Практи- ческие занятия, всего | Практи- ческие в эл. форме | Лабора- торные работы, всего | Лабора- торные в эл. форме | |
| 16. | Тема 16. Потенциалы взаимодействия. Граничные условия. | 8 | 2 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | |
| 17. | Тема 17. Подготовка системы для моделирования. Процедура инициализации (выбор силового поля, типа молекулы растворителя, кислотности). | 8 | 2 | 0 | 6 | 0 | 0 | 0 | |
| 18. | Тема 18. Решение уравнений движения. Методы интегрирования уравнений динамики. Учет термодинамически характеристик. | 8 | 4 | 0 | 6 | 0 | 0 | 0 | |
| 19. | Тема 19. Уравновешивание системы. Термодинамические ансамбли - NVT, NPT, NVE. | 8 | 4 | 0 | 6 | 0 | 0 | 0 | 5 |
| 20. | Тема 20. Анализ результатов молекулярного моделирования. Расчет экспериментально-наблюдаемых параметров. | 8 | 4 | 0 | 8 | 0 | 0 | 0 | 5 |
| 21. | Тема 21. Методы расчета свободной энергии | 8 | 4 | 0 | 10 | 0 | 0 | 0 | 5 |
| 22. | Тема 22. Эффективные потенциалы взаимодействия и метадинамика | 8 | 4 | 0 | 10 | 0 | 0 | 0 | 8 |
| 23. | Тема 23. Оценка точности расчета параметров моделей. Методы визуализации результатов моделирования | 8 | 2 | 0 | 4 | 0 | 0 | 0 | 3 |
| | Итого | | 66 | 0 | 106 | 0 | 0 | 0 | 80 |

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Введение в курс компьютерного моделирования молекулярных систем. Основные понятия квантовой механики и квантовой химии.

Предсказательные возможности современной квантовой химии, примеры. Неклассические молекулы. Связь между строением и свойствами молекул в биологии и медицине. Предсказательные возможности современной квантовой химии, примеры. Неклассические молекулы. Связь между строением и свойствами молекул в биологии и медицине. Современные возможности методов квантовой химии. Экспериментальные предпосылки квантовой механики: исследования атомных спектров, структуры атомов, открытие дискретности атомных состояний, открытие корпускулярных свойств света, открытие волновых свойств микрочастиц. Стационарное уравнение Шредингера. Волновая функция. Условия, которым должна удовлетворять волновая функция. Принцип Паули. Операторы. Постулаты квантовой механики. Представление волновой функции и операторов векторами и матрицами. Некоторые свойства матриц и операций над ними. Квантово-механическое описание простых квантовых систем: одномерное движение свободной частицы, трехмерное движение свободной частицы, движение частицы в одномерном бесконечном потенциальном ящике, частица в ящике с конечными стенками, столкновение частиц с потенциальным барьером, движение квантовой частицы в поле центральной силы. Квантовые числа.

Тема 2. Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома.

Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома: переход в сферическую систему координат, полином Лаггера, вид волновой функции, главное и орбитальное квантовые числа, выражение для уровней энергии, правило отбора по орбитальному квантовому числу. Атомные орбитали: сферическая часть АО (вид функции и графики), плотность вероятности, пространственное представление АО, радиальная часть АО (вид функции и графики). Явный вид функций для радиальной и угловой части волновой функции для водородоподобного атома. Нормированные волновые функции для водородоподобного атома. Атомная система единиц. Физическая интерпретация квантовых чисел (главное, орбитальное и магнитное квантовые числа) и связь движения с моментом импульса. Спин: экспериментальные предпосылки, энергия спин-орбитального взаимодействия, величина спина и проекция на направление магнитного поля.

Тема 3. Многоэлектронные атомы. Термы. Вариационный принцип. Теория возмущения

Решение уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. L-S связь и j-j связь. Термы многоэлектронных атомов: принципы написания. Правило Гунда. Классификация термов. Терм атома углерода. Приближенные методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных систем. Вариационный метод Ритца. Вековое уравнение. Порядок векового уравнения. Теория возмущения. Интеграл перекрывания, кулоновский интеграл, обменный интеграл.

Тема 4. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей.

Метод валентных связей. Образование ковалентной связи в молекуле водорода. Атомная плотность, обменная плотность. Качественное описание образования ковалентной связи. Физический смысл кулоновского и обменного интегралов. Ионная связь. Случай гомоядерной молекулы H_2 . Случай гетероядерной молекулы H-X. Принципиальные ограничения метода валентных связей. Метод молекулярных орбиталей. Метод МО ЛКАО (молекулярная орбиталь = линейная комбинация атомных орбиталей). Заполнение орбиталей электронами и взаимодействие орбиталей (пять случаев). Молекулярный ион водорода в рамках метода МО ЛКАО: характерные предельные случаи. Описание двухатомных молекул на языке МО ЛКАО: основные принципы описания. Симметричная классификация молекулярных состояний (σ -, π -, δ -орбитали). Соответствие между термами атомов и образуемых ими молекул.

Тема 5. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока. Молекулы с замкнутыми и открытыми оболочками.

Вывод уравнений Хартри-Фока. Кулоновский и обменный интегралы, их физический смысл. Детерминант Слетера и принцип Паули. Замкнутые и открытые оболочки. Спин-орбиталь. Энергия двухэлектронной системы с детерминантной волновой функцией Слетера. Уравнения Хартри-Фока для систем с замкнутой оболочкой. Особенности и основные свойства уравнений Хартри-Фока. Физический смысл и свойства орбиталей в методе Хартри-Фока. Теорема Купманса. Уравнения Хартри-Фока в приближении МО ЛКАО (уравнения Хартри-Фока-Рутана). Метод МО ССП. Молекулярные свойства, определяемые электронной волновой функцией: электронная и полная энергия молекулы, потенциал ионизации, плотность вероятности нахождения электрона в данной точке пространства, дипольный момент молекулы, нуклеофильные и электрофильные свойства молекул.

Тема 6. Свойства молекулярных систем.

Описание свойств молекулярных систем. Заряды атомов по Малликену, по Левдину, по Байдеру. Теория Байдера. Орбитальные заряды. Порядки связи и валентности атомов. Картина молекулярных орбиталей, природа химического связывания. Примеры молекул H_2 , HF, CH_4 . Связывающие и разрыхляющие молекулярные орбитали. Гибридизация орбиталей. Качественная теория молекулярных орбиталей. Корреляционные диаграммы (диаграммы Уолша): примеры.

Тема 7. Метод Хюккеля. Понятие электронной корреляции. Методы учета электронной корреляции.

Метод Хюккеля: этилен, аллильный и циклопропенильный радикалы. Молекулярный граф π -системы. Линейные графы (сопряженные полиены). Линейные графы с кратными ребрами. Точность квантовохимических методов. Основные источники погрешностей современных квантовохимических методов. Методы конфигурационного взаимодействия. Метод МКССП. Методы учета энергии корреляции, основанные на теории возмущений. Методы связанных кластеров. Сравнение различных методов учета корреляционной энергии.

Тема 8. Понятие базиса в квантовой химии. Типы базисных наборов.

Базисные наборы атомных орбиталей. Орбитали Слетера-Зенера. Недостатки АО Слетера-Зенера. Орбитали гауссова типа. Чистые сферические гауссовы функции (примитивы). Минимальные базисные наборы STO-KG. Валентно-расщепленные базисные наборы M-NPG. Поляризационные базисные наборы. Базисы с диффузными функциями. Корреляционно-согласованные базисные наборы. Базисы Karlsruhe. Уровни теории. Алгоритм работы вычислений.

Тема 9. Поверхности потенциальной энергии.

Определение поверхности потенциальной энергии (ППЭ). Поверхность потенциальной энергии двухатомной молекулы. Термодинамические параметры. Поверхность потенциальной энергии многоатомной молекулы. Вектор градиента. Матрица Гесса. Стационарные точки ППЭ. Седловые точки. Нахождение равновесной геометрии молекулярной системы.

Тема 10. Методы оптимизации. Поиск переходного состояния/

Оптимизация молекулярной структуры. Краткая характеристика методов оптимизации. Блок-схема оптимизации. Метод Ньютона-Рафсона. Метод Дэвида-Флетчера-Пауэла. Алгоритм BFGS. Метод градиентного спуска. Переходное состояние. Блок-схема поиска переходного состояния. Методы поиска переходных состояний. Метод реакционной координаты. Теория переходного состояния. Метод индексов реакционной способности. Молекулярный электростатический потенциал. Метод граничных орбиталей. Механизм химической реакции. Путь реакции. Координата реакции. Метод внутренней координаты реакции Fukui. IRC уравнение при использовании внутренних координат.

Тема 11. Полуэмпирические методы.

Возможности и ограничения полуэмпирических методов квантовой химии. Приближение нулевого дифференциального перекрытия. Метод CNDO (Complete Neglect of Differential Overlap) и параметризация CNDO/2. Метод INDO (Intermediate Neglect of Differential Overlap) и параметризация MINDO/3. Метод MNDO (Modified Neglect of Diatomic Overlap), AM1 (Austin Model 1), PM3 (Parameterized Model number 3).

Тема 12. Программное обеспечение квантовохимических расчетов.

Программы GAMESS, Gaussian, HyperChem, ПРИРОДА, WINMOPAC, программные комплексы Dalton и NWChem. Программы-интерпретаторы результатов квантово-химических расчетов: ChemCraft, ViewMol3D, Molekel, Molden, GaussView. Алгоритмы работы программ: методы, базисы, функционалы, свойства, параметры вычислений, области применения.

Тема 13. Метод функционала плотности (DFT).

Метод функционала плотности. Катастрофа Ван Флека: природа экспоненциальной ямы?. Метод Томаса-Ферми: пример функционала плотности. Теоремы Кона-Хюэнберга. Конечные температуры: теория Мермина. Уравнение Кона-Шэма (Kohn-Shame ansatz). Вариационный принцип Кона-Хюэнберга. Уравнение Кона-Шэма. Приближение локальной плотности (LDA). Формализм Кона-Шэма. Обменно-корреляционная энергия. Метод решения уравнения Кона-Шэма. Временные эффекты в методе функционала плотности (TDDFT). Вариационный принцип Френкеля. Функционал плотности для нестационарных систем. Функционал спиновой плотности. Функционал плотности в теории сверхпроводимости. Квантовая молекулярная динамика. Сравнение методов Хартри-Фока и Кона-Шэма. Обменно-корреляционные функционалы. Методы градиентной коррекции. Гибридные методы. Вычислительные особенности DFT методов. Качество расчета методов функционала плотности.

Тема 14. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий.

Межмолекулярные взаимодействия. Оценка энергии межмолекулярного взаимодействия. Кристаллохимический дизайн. Оценка ван-дер-ваальсовых атомных радиусов. Донорно-акцепторные молекулярные комплексы. Специфические невалентные взаимодействия. Водородная связь. Хемосорбция. Понятие о супрамолекулярной химии.

Тема 15. Основы молекулярно-динамического моделирования Межатомные взаимодействия.

История. Область применения. Решение уравнений движения частиц. Иерархия потенциалов взаимодействия для различной степени детализации моделируемой системы. Модели взаимодействия нейтральных атомов и молекул. Моделирование макромолекул и полимеров. Оценка вычислительной сложности для больших молекулярных систем.

Тема 16. Потенциалы взаимодействия. Граничные условия.

Силовые поля. Основные представления о силовых полях. Типы атомов, связей углов и взаимодействий. Функциональный вид взаимодействий. Начальные и граничные условия при интегрировании уравнений движения. Метод ближайшего образа. Методы суммирования Эвальда по обратной решетке для далекодействующих взаимодействий.

Тема 17. Подготовка системы для моделирования. Процедура инициализации (выбор силового поля, типа молекулы растворителя, кислотности).

Силовые поля Amber, CHARMM и OPLS. Биополимеры - белки и пептиды. Аминокислотные остатки, их классификация. Влияние кислотности среды на степень протезирования. Модели молекулы воды. Описание структуры и топологии молекулярной системы. Понятие о поверхности потенциальной энергии. Алгоритмы минимизации энергии.

Тема 18. Решение уравнений движения. Методы интегрирования уравнений динамики. Учет термодинамически характеристик.

Алгоритмы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Алгоритм Верле. Ошибки интегрирования и ошибки округления. Точность сохранения энергии в МД системе. Выбор оптимального шага по времени. Применение термостатов и баростатов. Применение термостатов (Ланжевена, Андерсона, Нозе-Гувера) и баростатов при моделировании методом молекулярной динамики. Нахождение оптимальных параметров термостата и баростата для исследуемой системы.

Тема 19. Уравновешивание системы. Термодинамические ансамбли - NVT, NPT, NVE.

Обзор статистических ансамблей: микроканонического, канонического, большого канонического, изотермо-изобарического. Моделирование физических процессов в конкретных ансамблях. Вопросы сохранения энергии в расчете. Получение зависимости флуктуации энергии от шага интегрирования. Вывод системы на равновесие. Критерии достижения равновесия.

Тема 20. Анализ результатов молекулярного моделирования. Расчет экспериментально-наблюдаемых параметров.

Исследование микроструктуры системы. Понятие времени динамической памяти. Расчет невязок координат и скоростей. Расчет радиальной функции распределения в используемой модели. Методы Эйнштейна-Смолуховского и Грина-Кубо для расчета коэффициента диффузии, Эйнштейна-Гельфанда и Грина-Кубо для расчета вязкости. Вопросы сходимости используемых методов.

Тема 21. Методы расчета свободной энергии

Свободная энергия Гиббса и Гельмгольца. Поверхность свободной энергии. Метод зонтичной выборки (umbrella sampling). Понятие о коллективных переменных и псевдопотенциалах. Способы построения профиля свободной энергии по результатам зонтичной выборки: зонтичное интегрирование, метод взвешенных гистограмм, оценочная функция Бенетта для многих состояний. Симулированный отжиг как метод поиска локальных минимумов энергии. Оценка ошибки для оценки свободной энергии .

Тема 22. Эффективные потенциалы взаимодействия и метадинамика

Способы ускорения прохождения системой конформационного пространства при расчете поверхности свободной энергии. Протоколы молекулярной метадинамики. Моделирование ансамбля молекулярных систем, условия достижения сходимости при моделировании. Проблема эргодичности траекторий. Вычисление вероятностей состояний для метадинамики.

Тема 23. Оценка точности расчета параметров моделей. Методы визуализации результатов моделирования

Анализ траекторий. Методы сравнения структур биомолекул - анализ двугранных углов, карты Рамачандрана, среднеквадратичное отклонение положения атомов и флуктуация среднеквадратичного отклонения. Колебания энергии, температуры давления и плотности на протяжении молекулярной динамики. Анализ водородных связей. Кластерный анализ.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-99бин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

Методические пособия по курсу - <https://kpfu.ru/metodicheskie-posobiya-studentam-4083.html>

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Gamess - <http://www.msg.ameslab.gov/gamess/>

Gaussian - <http://gaussian.com/keywords/>

ORCA - <https://orcaforum.cec.mpg.de/>

Задачи по курсу - http://kpfu.ru/docs/F1484311321/list_of_exercise.pdf

Задачи по курсу - http://kpfu.ru/docs/F710814298/Exercise_mod.pdf

Задачи по курсу - <http://kpfu.ru/docs/F2043134078/Exercise1.pdf>

Методические пособия Аминовой П.М. - <https://kpfu.ru/metodicheskie-posobiya-studentam-4083.html>

Расчеты электронного строения и свойств молекул полуэмпирическими методами квантовой химии. Методическое пособие для работы на компьютере - http://kpfu.ru/docs/F1139401699/on%20komp_QCh.pdf

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

| Вид работ | Методические рекомендации |
|----------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| лекции | Лекция - это логически стройное, системное, глубокое и ясное изложение учебного материала. Назначение современной лекции в учебном процессе в том, чтобы помочь освоить фундаментальные проблемы курса, овладеть методами научного познания, предложить новейшие достижения научной мысли. В учебном процессе лекция выполняет методологическую, организационную и информационную функции. В ряде случаев лекция является основным источником информации, например, при отсутствии учебников, учебных пособий по новым курсам. Лекция раскрывает понятийный аппарат конкретной области знания, ее проблемы, дает цельное представление о предмете, показывает взаимосвязь с другими дисциплинами. Все другие формы учебных занятий - семинары, лабораторные занятия, курсовое и дипломное проектирование, учебная практика, консультации, зачеты и экзамены - связаны с лекцией, опираются на фундаментальные положения и выводы. |
| практические занятия | Аудиторные практические занятия играют исключительно важную роль в выработке у студентов навыков применения полученных знаний для решения практических задач в процессе совместной деятельности с преподавателями. Практические занятия служат своеобразной формой осуществления связи теории с практикой. Структура практических занятий в основном одинакова - вступление преподавателя, вопросы студентов по материалу, который требует дополнительных разъяснений, собственно практическая часть, заключительное слово преподавателя. Разнообразие возникает в основной, собственно практической части, включающей рефераты, доклады, дискуссии, тренировочные упражнения, решение задач, наблюдения, эксперименты и т. д. Опыт показывает, что нельзя на практических занятиях ограничиваться выработкой только практических навыков, техникой решения задач, построения графиков и т. п. Студенты должны всегда видеть ведущую идею курса и связь ее с практикой. Цель занятий должна быть понятна не только преподавателю, но и студентам. Это придает учебной работе жизненный характер, утверждает необходимость овладения опытом профессиональной деятельности, связывает их с практикой жизни. |

| Вид работ | Методические рекомендации |
|------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| самостоятельная работа | <p>Самостоятельная учебная работа представлена такими формами учебного процесса, как лекция, семинар, практические и лабораторные занятия, экскурсии, подготовка к ним. Студент должен уметь вести краткие записи лекций, составлять конспекты, планы и тезисы выступлений, подбирать литературу и т.д. Различают следующие уровни самостоятельной работы студента: низкий, средний, высокий. Для каждой специальности и дисциплины разрабатываются свои критерии оценки данных уровней. Ведущими путями самостоятельной работы студентов являются репродуктивный, самостоятельный и поисковый. Мотивы самообразования:</p> <ul style="list-style-type: none"> - стихийные, неустойчивые (любопытность, интерес к предмету, ко всему окружающему); - познавательные (рост самообразования); - социально - значимые (связанные с реализацией идеалов и жизненных планов, призвания). <p>Различают следующие характеры знаний:</p> <ul style="list-style-type: none"> - локальный (не объединяются с другими, быстро забываются ? возрастает удельный вес знаний, улучшается их качество); - целостный (знания глубокие, прочные, разносторонние, универсальные). <p>Умения работать с источниками:</p> <ul style="list-style-type: none"> - не систематизированы; студенты много читают, обращаются к дополнительной литературе эпизодично; - систематизированы: чтение вдумчивое; отмечается главное; делаются выписки; - рациональное применение различных источников информации: анализирует, соотносит с поставленными целями и задачами. |
| зачет | <p>Обычно зачет проводится по итогам семестра перед сессией в письменной или устной форме, причем преподаватель может включать в него вопросы как практических занятий, так и лекционных (что особенно уместно, когда по данному предмету не сдается экзамен). Главное отличие зачета от экзамена, почти всегда не пяти-, а двухбалльная система оценки (сдал- не сдал), что делает его получение несколько более простым делом. С другой стороны, порой процедура его сдачи достаточно сложна, а иногда применяется и пятибалльная оценка (так называемый дифференцированный зачет). Таким образом, для сдачи зачета необходимо, прежде всего, выполнить все требования преподавателя, что предполагает знание этих требований. Нужно как можно раньше выяснить, какие вопросы предстоит готовить и каковы правила самой процедуры (учитывается ли посещаемость, надо ли пропущенные занятия отрабатывать, а если надо, то каким образом и т.д.). Практика показывает, что хорошее посещение занятий является почти полной гарантией получения зачета, так как тогда можно быть в курсе всех требований преподавателя. И, напротив, большое количество пропусков может осложнить жизнь даже сильному студенту. Кроме того, необходимо учитывать, что проблемы могут появиться при распространенном подходе студента к практическим занятиям, когда многие работают первые месяцы вполсилы, накапливая задолженность по выполнению рефератов, практических заданий, конспектов и пр., а перед сессией пытаются все это сделать за одну неделю. Старайтесь распределять силы равномерно по всей дистанции семестра, и тогда зачетная неделя перед сессией будет не самой напряженной, а самой разгрузочной.</p> |
| экзамен | <p>Экзамен - один из самых ответственных видов самостоятельной работы, и в то же время возможность сэкономить большое количество времени в период сессии, если эту подготовку начинать заблаговременно. Одно из главных правил - представлять себе общую логику предмета, что достигается проработкой планов лекций, составлением опорных конспектов, схем, таблиц. Фактически основной вид подготовки к экзамену ? свертывание? большого объема информации в компактный вид, а также тренировка в ее ?развертывании? (примеры к теории, выведение одних закономерностей из других и т.д.). Владение этими технологиями обеспечивает, пожалуй, более половины успеха. Тем более что преподаватель обычно замечает в течение семестра целенаправленную подготовку такого студента и может поощрить его тем или иным способом. Необходимо выяснить условия проведения, самого экзаменационного испытания, используя для этой цели прежде всего консультацию (хотя преподаватель обычно касается этой темы заранее): количество и характер вопросов, форма проведения (устно или письменно), возможность использовать при подготовке различные материалы и пособия (таблицы, схемы, тетради для практических занятий и т.д.). При подготовке к экзамену необходимо опираться, прежде всего, на лекции, а также на источники, которые указаны в списке литературы. В каждом билете на зачете содержится два вопроса. По каждому вопросу должен быть подготовлен развернутый, исчерпывающий ответ. При неполном ответе могут быть заданы дополнительные наводящие вопросы.</p> |

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 03.03.02 "Физика" и профилю подготовки "Физика живых систем".

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 03.03.02 - Физика
Профиль подготовки: Физика живых систем
Квалификация выпускника: бакалавр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2021

Основная литература:

1. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул : учебное пособие / И. Майер ; под редакцией А. Л. Чугреева ; перевод с английского М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 387 с. - ISBN 978-5-00101-501-7. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/94102> (дата обращения: 26.05.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. - 4-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - ISBN 978-5-00101-502-4. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/94104> (дата обращения: 26.05.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. - 3-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2019. - 428 с. - ISBN 978-5-8114-3961-4. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/113631> (дата обращения: 26.05.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература:

1. Юрчук, С. Ю. Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур. Моделирование наносистем методами молекулярной динамики. Курс лекций : учебное пособие / С. Ю. Юрчук. - Москва : МИСИС, 2013. - 47 с. - ISBN 978-5-87623-663-0. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/47471> (дата обращения: 26.05.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Аминова, Р. М. Поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Квантовохимические методы анализа ППЭ: учебное пособие / Р. М. Аминова. - Казань: Казан.ун-т, 2015 - 106 с. - URL: http://dspace.kpfu.ru/xmlui/bitstream/net/20296/1/06_51_001056.pdf (дата обращения: 26.05.2020). - Режим доступа: открытый.

*Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.07.01 Компьютерное моделирование молекулярных систем*

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 03.03.02 - Физика
Профиль подготовки: Физика живых систем
Квалификация выпускника: бакалавр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2021

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)
Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010
Браузер Mozilla Firefox
Браузер Google Chrome
Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC
Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.