

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего  
профессионального образования  
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
*Факультет биоинженерии и биоинформатики*

**УТВЕРЖДАЮ**

Декан  
факультета биоинженерии  
и биоинформатики,  
академик

\_\_\_\_\_/В.П. Скулачев /

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Наименование дисциплины:**

**Практикум по квантовой биохимии**

**Уровень высшего образования:**  
**специалитет**

**Направление подготовки (специальность):**

**06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика**

**Форма обучения:**

**очная**

Рабочая программа рассмотрена и одобрена

*Ученым советом факультета*

(протокол № \_\_\_\_\_, \_\_\_\_\_)

Москва 20\_\_

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по специальности 06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика» (программы специалитета) в редакции приказа МГУ от 30 декабря 2016 г.

Год (годы) приема на обучение – 2016, 2017, 2018, 2019.

© Факультет биоинженерии и биоинформатики МГУ имени М.В. Ломоносова

*Программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения факультета.*

## Цель и задачи дисциплины

**Цель курса:** знакомство студентов с современными методами неэмпирического моделирования молекулярных систем и с программами квантовохимического и молекулярно-динамического моделирования (GAMESS, Firefly, Tinker)

**Задачи курса:** научиться применять современные методы неэмпирического моделирования при изучении свойств и химических превращений конкретных биологических молекул, умение выбирать адекватные методы моделирования при решении конкретных задач и интерпретировать полученные результаты

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО – вариативная часть, курс по выбору, курс V- семестр 9.

2. Входные требования для освоения дисциплины: освоение дисциплины «Квантовая химия и строение молекул».

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине:

**Знать:** методы решения задач молекулярного моделирования, в частности определения электронного строения молекул и их устойчивых ядерных конфигураций; оценки энергий систем и построения путей химических превращений; описания основных и возбужденных состояний молекул; учета влияния среды.

**Уметь:** применять современные методы неэмпирического моделирования при изучении свойств и химических превращений конкретных биологических молекул; выбирать адекватные методы моделирования при решении конкретных задач и интерпретировать полученные результаты/

**Владеть:** навыками построения начальных приближений и формирования входных файлов при решении задач определенного типа, в частности с использованием графических программ-визуализаторов и баз данных структур; запуска расчетов и диагностики возможных ошибок.

**Иметь опыт** выполнения квантовохимических расчетов с использованием современного лицензионного свободно распространяемого программного обеспечения, в частности программных пакетов GAMESS, Firefly.

4. Формат обучения: практические занятия

5. Объем дисциплины составляет 2 з.е., в том числе 28 академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем, 44 академических часов на самостоятельную работу обучающихся.

## 6. Краткое содержание дисциплины (аннотация):

*Определение оптимальной геометрии различных форм модельного хромофора (нейтральной, цвиттерионной, катионной, анионной) при наличии и в отсутствии растворителя; оценка относительной устойчивости различных форм и ее изменения при переходе от газовой фазы к бесструктурному растворителю, рассматриваемому как непрерывная поляризуемая диэлектрическая среда; нормально-координатный анализ колебаний каждой из форм с выявлением уникальных для данной формы колебаний и*

последующее сопоставление расчетных спектров с экспериментальными Поиск переходного состояния процесса переноса протона по цепочке аминокислот и оценка энергетического барьера этого процесса в основном электронном состоянии (с учетом и без учета влияния среды) с использование различных методов и различных базисов. Оценка энергии электронного возбуждения модельного фрагмента хромофора, включающего цепочку переноса протона, в различных точках реакционного пути (реагенты, седловая точка, продукты) при наличии и при отсутствии растворителя. Практическое изучение комбинированного квантово-классического метода описания систем Моделирование фрагмента белка с использованием комбинированного квантово-классического подхода с описанием хромофора в рамках квантового подхода, а окружающего его белка — в рамках классической механической модели и при использовании различных способов включения квантовой части в молекулярно-механическую систему.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины,  Форма промежуточной аттестации по дисциплине	Всего (часы)	В том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы			Самостоятельная работа обучающегося, часы (виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Тема 1. Базисные наборы. Метод Хартри-Фока	10	2	2	4	6
Тема 2. Определение устойчивых конфигураций молекул. Анализ распределения электронной плотности	10	2	2	4	6
Тема 3. Определение возможных конформеров молекул. Оценка влияния растворителя	10	2	2	4	6
Тема 4. Поиск переходных состояний. Моделирование элементарного химического акта.	10	2	2	4	6
Тема 5. Изучение электронно-возбужденных состояний молекул. Метод	10	2	2	4	6

конфигурационного взаимодействия					
Тема. 6. Неэмпирическая молекулярная динамика.	10	2	2	4	6
Тема .7 Использование комбинированного квантово-классического подхода. Метод эффективных потенциалов фрагментов.	10	2	2	4	6
Промежуточная аттестация - зачет					2
Итого	72	28		44	

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине

7.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости отсутствуют.

7.2. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

(1) Создать входные файлы и выполнить расчет энергии заданной молекулы при двух возможных конфигурациях при использовании метода Хартри-Фока и предложенного базиса. Сопоставить энергии структур и распределение зарядов.

(2) На основании имеющейся в базе данных NIST информации построить структуру предложенной молекулы с использованием графической программы-визуализатора и выполнить оптимизацию конфигурации молекулы в газовой фазе и в непрерывной среде с заданной диэлектрической постоянной. Сравнить полученные структуры и колебания молекулы.

(3) Для предложенного химической бимолекулярной реакции построить структуры реагентов и продуктов с использованием базы данных NIST; предположить структуру переходного состояния и выполнить его поиск с использованием предложенного квантовохимического метода и базисного набора. Определить энергию активации и оценить константу скорости превращения.

(4) Для предложенной молекулы найти оптимальную конфигурацию в основном электронном состоянии. Проанализировать верхние занятые и нижние вакантные орбитали молекулы. Предложить небольшой набор орбиталей, которые надо учесть при построении возбужденных электронных конфигураций и с использованием метода KB1+2 и выбранного активного пространства орбиталей выполнить расчет энергий низших двух возбужденных состояний молекулы.

(5) Для заданной молекулярной системы выполнить поиск ее оптимальной конфигурации в водном растворе в предположении (а) что она не образует связи с молекулами растворителя и может быть использовано приближение непрерывной среды с заданной диэлектрической постоянной и (б) что она может формировать межмолекулярные связи с молекулами воды и надо использовать подход эффективных фрагментов для описания молекул среды. Определить, какой вариант корректно представляет интересующую систему.

#### Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
<b>Знание:</b> методов решения задач молекулярного моделирования, в	Знания отсутствуют	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания

<p>частности определения электронного строения молекул и их устойчивых ядерных конфигураций; оценки энергий систем и построения путей химических превращений; описания основных и возбужденных состояний молекул; учета влияния среды.</p>				
<p><b>Умение</b> применять современные методы неэмпирического моделирования при изучении свойств и химических превращений конкретных биологических молекул; выбирать адекватные методы моделирования при решении конкретных задач и интерпретировать полученные результаты/</p>	<p>Умения отсутствуют</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое умение</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности не принципиального характера)</p>	<p>Успешное и систематическое умение</p>
<p><b>Владение</b> навыками построения начальных приближений и формирования входных файлов при решении задач определенного типа, в частности с использованием графических программ-визуализаторов и баз данных структур; запуска расчетов и</p>	<p>Навыки владения отсутствуют</p>	<p>Наличие отдельных навыков (наличие фрагментарного опыта)</p>	<p>В целом, сформированные навыки (владения), но используемые не в активной форме</p>	<p>Сформированные навыки (владения), применяемые при решении задач</p>

диагностики возможных ошибок.				
----------------------------------	--	--	--	--

#### 8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и дополнительной литературы

##### Основная литература

1. Ю.В. Новаковская. «Молекулярные системы. Теория строения и взаимодействия с излучением». Часть I (Общие основы квантовой механики и теории симметрии). Москва: УРСС, 2004, 102 с. Часть II (Квантовые состояния молекул). Москва: УРСС, 2004, 173 с.
2. F. Jensen. Introduction to Computational Chemistry. - Chichester: Wiley, 1999
3. A. Szabo, N. Ostlund. Modern Quantum Chemistry (Introduction to Advanced Electronic Structure Theory). - New-York: Dover, 1996

##### Дополнительная литература

1. Ю.В. Новаковская. Оценка константы скорости и константы равновесия простой реакции на основании квантово-химических расчетов:

<http://www.chem.msu.su/rus/teaching/novakovskaya/NovakovskayaYV.pdf>

2. T.D. Kühne, Ab-Initio Molecular Dynamics. ArXiv:1201.5945
3. M.S.Gordon, M.A.Freitag, P.Bandyopadhyay, J.H.Jensen, V.Kairys, W.J.Stevens. The Effective Fragment Potential Method: a QM-based MM approach to modeling environmental effects in chemistry. J. Phys. Chem. A 105, 293-307 (2001).

- Перечень лицензионного программного обеспечения: лицензионные программы Chemcraft, GAMESS, Firefly
- Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем
  - база данных NIST: <https://webbook.nist.gov>
  - база данных CCCBDB: <http://cccbdb.nist.gov/>
- 

##### Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

- Firefly documentation. <http://classic.chem.msu.su/gran/games/index.html>
- GAMESS documentation. <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/>
- QM/MM documentation. <http://classic.chem.msu.su/gran/games/forum/attach/QMMM%20input%20documentation%2001Aug07.htm>

- Описание материально-технического обеспечения. Компьютерный класс