

**Государственное образовательное учреждение высшего
профессионального образования Московской области «Международный
университет природы, общества и человека «Дубна»
(университет «Дубна»)
Факультет естественных и инженерных наук
Кафедра Биофизики**

УТВЕРЖДАЮ

проректор по учебной работе

_____ С.В. Моржухина

«_____» _____ 20 г.

ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Молекулярная динамика

(наименование дисциплины)

по направлению (специальности)

140307.65 Радиационная безопасность человека и окружающей среды

(№, наименование направления, специальности)

Форма обучения: очная

Уровень подготовки: специалист

Курс (семестр): 2 курс (3 семестр)

г. Дубна, 2010 г.

Автор программы: Алтайский Михаил Викторович, д.ф.-м.н., профессор кафедры
биофизики

ФИО, ученое звание, кафедра _____

(подпись)

Программа составлена в соответствии с Государственным образовательным стандартом
высшего профессионального образования и учебным планом по направлению подготовки
(специальности) 140307.65 Радиационная безопасность человека и окружающей среды

(код и наименование направления подготовки (специальности))

Программа рассмотрена на заседании кафедры _____

(название кафедры)

Протокол заседания № _____ от «_____» _____ 20____ г.

Заведующий кафедрой _____ / проф. Красавин Е.А. /

(ученое звание)

(подпись)

(фамилия, имя, отчество)

СОГЛАСОВАНО

заведующий выпускающей кафедрой¹ _____ / _____ /

(ученое звание)

(подпись)

(фамилия, имя, отчество)

«_____» _____ 20__ г.

Рецензент: _____

(ученая степень, ученое звание, Ф.И.О., место работы, должность)

Руководитель библиотечной системы _____ / _____ /

(подпись)

(ФИО)

¹ Для программ общеуниверситетских кафедр

1. Аннотация

Специальный курс «Молекулярная динамика» для студентов специальности - 140307.65 Радиационная безопасность человека и окружающей среды предназначен для освоения студентами знаний в области фундаментальной и прикладной радиационной биологии и входит в учебный план в цикле факультативных дисциплин, изучается на втором курсе в третьем семестре. Целью разработанного курса является изучение методов компьютерного молекулярного моделирования конформационных свойств и динамики биологических молекул. В рамках преподавания данной дисциплины рассматриваются методы моделирования белков и нуклеиновых кислот, взаимодействующих с водным или иным окружением. При составлении программы курса основное внимание уделено современному состоянию данной области науки. Цель теоретической части – заложить основы глубоких знаний в области фундаментальной и прикладной радиационной биологии

Настоящий курс является факультативной дисциплиной в ГОС ВПО и посвящен изложению современных сведений в области компьютерного молекулярного моделирования конформационных свойств и динамики биологических молекул. Курс рассчитан на студентов, обладающих определенными знаниями в области физики, молекулярной биологии, цитологии, химии, биофизики, дозиметрии.

В программу курса входят различные разделы, касающиеся основных методов компьютерного моделирования, классических методов молекулярной динамики, изучения базовых пакетов программ, предназначенных для молекулярного моделирования, форматами данных, программами визуализации.

Тип курса - ФТД (специальные дисциплины)

Год обучения - 2

Семестр – 3

	ФТД Факультативы	
ФТД 1	Молекулярная динамика	167

Место курса в профессиональной подготовке

Курс опирается на знания студентов, приобретенные при изучении основ общей биологии, общей физики, аналитической химии, теории вероятностей и математической статистики, линейной алгебры и обеспечивает теоретическую подготовку и практические навыки в области фундаментальной и прикладной радиационной биологии.

Методы и формы обучения студентов:

в ходе изучения дисциплины предусмотрены лекции по программе, разработанной проф. Алтайским М.В., проведение семинаров и самостоятельная работа студентов.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме 99 часа, выполняется в ходе семестра в форме изучения отдельных разделов тем дисциплины, чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; подготовку к практическим занятиям; работу с Интернет-источниками; подготовку к различным формам контроля.

Виды текущего контроля – контроль посещаемости лекций, проведение коллоквиумов, тестирование. выступления на семинарских занятиях.

Форма итогового контроля

Зачет

2. Цель и задачи дисциплины

Целью преподавания данной дисциплины является изложение методов компьютерного молекулярного моделирования конформационных свойств и динамики биологических молекул. В рамках преподавания данной дисциплины рассматриваются методы моделирования белков и нуклеиновых кислот, взаимодействующих с водным или иным окружением.

Основными **задачами** освоения дисциплины являются знакомство студентов с:

- классическими методами молекулярной динамики, основанными на численном решении ньютоновских уравнений для больших систем.
- вычислительными методами квантовой химии (*ab initio*).
- использованием данных методов в задачах радиационной биологии, фотобиологии, иммунологии.
- биологическими базами экспериментальных данных по структуре белков и нуклеиновых кислот.
- работа со стандартными программами молекулярного моделирования, форматами данных, программами визуализации.

3. Требования к уровню освоения содержания дисциплины.

В ходе изучения дисциплины студенты получают:

- **знания** об основных методах компьютерного молекулярного моделирования конформационных свойств и динамики биологических молекул.
- **умение** использовать полученные знания о данных методах в задачах радиационной биологии, фотобиологии, иммунологии.
- **навыки** работы со стандартными программами молекулярного моделирования, форматами данных, программами визуализации.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы (час):

Вид занятий	Всего часов	Семестры
		3
Общая трудоемкость	167	167
Аудиторные занятия:	68	68
Лекции	34	34
Практические занятия (ПЗ)		
Семинары (С)	34	34
Лабораторные работы (ЛР)		
Самостоятельная работа:	99	99
Курсовой проект (работа)		
Расчетно-графические работы		
Реферат		
Вид итогового контроля	Зачет	Зачет

5. Разделы (темы) дисциплины, содержание и виды занятий

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины, содержание	Лекции	ПЗ (или С)	ЛР	Самостоятельная работа студентов
1.	Введение в методы молекулярного моделирования (обзор основных направлений)	2	2		3
2.	Классические методы молекулярной динамики (МД).	2	2		6
3.	Эффективные потенциалы взаимодействия в классической МД	2	2		6
4.	Термостаты и баростаты	2	2		6
5.	Моделирование систем со связями	2	2		6
6.	Расчет электростатических взаимодействий	2	2		7
7.	Учет влияния среды	2	2		5
8.	Параллельные и распределенные вычисления	2	2		7
9.	Расчет наноструктур. Пакет DL_POLY.	2	4		8
10.	Расчет белковых структур. Пакет AMBER.	2	2		8
11.	Форматы данных. Визуализация.	2	2		6
12.	Введение в методы <i>ab initio</i> .	2	2		6
13.	Численные методы решения уравнения Шредингера.	2	2		6
14.	Молекулярные орбитали.	2	2		6
15.	Пакеты Gaussian и GAMESS	2	2		8
16.	Форматы данных визуализации	2	2		6
17.	Зачет	2			

Содержание разделов дисциплин

1. Методы компьютерного моделирования белков и нуклеиновых кислот. Методы Монте-Карло. Методы молекулярной динамики. Методы *ab initio*. Условия применимости классической динамики к задачам *in vivo* и *in vitro*.
2. Методы численного решения ньютоновских уравнений. Силовое поле. Граничные условия. Задачи без связей и со связями.
3. Усреднение квантовомеханических потенциалов. Потенциалы внутримолекулярной связи, угловой связи, диэдральный (торсионный), электростатический, эмпирические потенциалы.
4. Диссипация в уравнениях МД. Связь с термодинамикой типы ансамблей. Интегрирование уравнений со случайной силой. Термостаты и баростаты.
5. Моделирование систем со связями. Жесткие блоки. Алгоритм SHAKE.

6. Прямой расчет кулоновских сумм. Метод Эвальда. Быстрый мультипольный метод. Аппаратная реализация расчета электростатических потенциалов.
7. МД модели молекулы воды. Введение сольвента в пакете AMBER.
8. Параллельные и векторные вычисления. Протокол MPI. Вычислительные кластеры. GRID.
9. Расчет газов и систем без связей с использованием пакета DL_POLY. Конфигурационные файлы.
10. Кристаллографические данные о структуре белков. Ресурсы в Интернете. Формат PDB. Формат huz, Z-матрица. Структура пакета AMBER: Leap и Sander. Силовое поле. Параметры методов.
11. Графический редактор Xleap. Программа MOLMOL. Подготовка экспериментальных данных к моделированию. Некристаллизующиеся белки: гомологичное моделирование.
12. Введение в вычислительные методы квантовой химии. Численное решение уравнения Шредингера с электростатическим потенциалом. Система атомных единиц Хартри. Метод Хартри-Фока. Оптимизация геометрии. Применимость к задачам фотобиологии.
13. Атомные орбитали и молекулярные орбитали. Метод самосогласованного поля. Метод функционала плотности.
14. Метод молекулярных орбиталей. Различные типы молекулярных орбиталей. Типы базисов. Использование симметрии.
15. Пакеты Gaussian и GAMESS: методы вычислений, конфигурационные файлы, форматы данных.
16. Создание входных файлов. Редактор MOLDEN. Визуализация молекулярных орбиталей в программе gOpenMol.

Тематика семинарских занятий

№	Тема семинарского задания	Неделя
1	Введение в методы молекулярного моделирования (обзор основных направлений)	1
2	Классические методы молекулярной динамики (МД).	2
3	Эффективные потенциалы взаимодействия в классической МД	3
4	Термостаты и баростаты	4
5	Моделирование систем со связями	5
6	Расчет электростатических взаимодействий	6
7	Учет влияния среды	7
8	Параллельные и распределенные вычисления	8
9	Расчет наноструктур. Пакет DL_POLY.	9
10	Расчет белковых структур. Пакет AMBER.	10
11	Форматы данных. Визуализация.	11
12	Введение в методы <i>ab initio</i> .	12
13	Численные методы решения уравнения Шредингера.	13
14	Молекулярные орбитали.	14
15	Пакеты Gaussian и GAMESS	15
16	Форматы данных визуализации	16

6. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

Основная литература

1. Рубин А.Б. Биофизика : Учебник для вузов: В 2 т. Т.1 : Теоретическая биофизика/ Рубин Андрей Борисович ; МГУ им. М.В.Ломоносова. - 3-е изд.,испр.и доп. - М. : Наука : Издательство Московского университета, 2004. - 469с. : ил. - (Классический университетский учебник). - Рек.лит.:с.459.-Предм.указ.:с.461. // ЭБС «КнигаФонд». - URL: <http://www.knigafund.ru/books/19009> (дата обращения: 30.08.2011).-Режим доступа: с компьютеров ун-та «Дубна».
2. Закгейм А.Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие. Изд.: Университетская книга4 Логос, 2009, 303 стр. // ЭБС «КнигаФонд». - URL: <http://www.knigafund.ru/books/112649> (дата обращения: 30.08.2011).-Режим доступа: с компьютеров ун-та «Дубна».
3. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: Учебное пособие. Изд. БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010, 495 стр. // ЭБС «КнигаФонд». - URL: <http://www.knigafund.ru/books/42620> (дата обращения: 30.08.2011).- Режим доступа: с компьютеров ун-та «Дубна».
4. Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования: учебное пособие. Изд.: ФИЗМАТЛИТ, 2009, 224 стр. // ЭБС «КнигаФонд». - URL: <http://www.knigafund.ru/books/106374> (дата обращения: 30.08.2011).-Режим доступа: с компьютеров ун-та «Дубна».

Дополнительная литература

1. Алтайский М.В. Вычислительные методы квантовой химии в биологических задачах. // Сборник трудов кафедры биофизики Международного университета РАЕН, 2006. – с.99 - 134

7. Технические и электронные средства обучения

Лекционные материалы в виде Power Point – презентации.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

(указываются специализированные лаборатории и классы, основные приборы, установки)

- Мультимедийный проектор,
- Проектор «overhead»
- Компьютеры
- Установленные пакеты специальных программ

9. Формы контроля

Занятия по курсу «Молекулярная динамика» проводятся в виде лекций и семинаров. В ходе изучения дисциплины используются различные виды контроля студента: опросы, контрольные работы, решение задач на семинарах и в домашних условиях.

Перечень обязательных видов работы студента:

- посещение лекционных занятий;
- ответы на теоретические вопросы на семинаре;
- решение практических задач и заданий на семинаре;
- выполнение самостоятельных работ;
- выполнение контрольных работ;

В ходе изучения дисциплины предусматриваются текущий контроль знаний, промежуточная и итоговая аттестации.

Текущий контроль знаний организуется путем краткого опроса по пройденному на предыдущем семинаре материалу и проверки домашних заданий и самостоятельных работ.

Итоговая аттестация проводится в виде зачета. Зачет проводится на 17-ой неделе семестра и формируется на основе текущего контроля успеваемости, а также проведенного опроса.