

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

фізичний факультет

(назва факультету)

Кафедра фізики функціональних матеріалів



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

КОМП'ЮТЕРНА ФІЗИКА БІОМОЛЕКУЛ

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки
спеціальність 104: Фізика та астрономія
освітній ступень магістр
освітня програма Медична фізика
вид дисципліни обов'язкова (ОК4)

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2021/2022</u>
Семестр	<u>3</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>6</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>іспит</u>

Викладачі: Момот Андрій Іванович

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» ____ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» ____ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

Розробники: Момот Андрій Іванович, доктор фіз.-мат. наук, доцент кафедри фізики функціональних матеріалів

ЗАТВЕРДЖЕНО


Зав. кафедри фізики функціональних матеріалів

_____ (Микола КУЛІШ)
(підпис) 

Протокол № 10 від «20» травня 2021 р.

Схвалено науково - методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 4 від «22» червня 2021 року

Голова науково-методичної комісії _____ (Олег ОЛІХ)
(підпис) 

«_____» _____ 20__ року

ВСТУП

1. Мета дисципліни – отримання студентами теоретичного підґрунтя та практичних навиків дослідження фізичних і хімічних властивостей молекул, зокрема біомолекул, в програмному комплексі Gaussian з використанням графічного інтерфейсу GaussView.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

- Знати основні принципи і математичний апарат квантової механіки, елементи квантової механіки багатьох частинок і статистичної фізики. Пам'ятати рівняння Шрьодінгера і його застосування для опису атому водню. Оператор моменту імпульсу і його власні значення.
- Вміти застосовувати знання з квантової механіки, математичного аналізу, диференціальних рівнянь, лінійної алгебри для виконання математичних перетворень і розв'язування диференціальних рівнянь.
- Володіти елементарними навичками математичних перетворень, знаходження похідних та інтегралів, дій з векторами та матрицями.

3. Анотація навчальної дисципліни:

Дисципліна «Комп'ютерна фізика біомолекул» є обов'язковою компонентою освітньої програми «Медична фізика». В рамках курсу розглядаються: загальні питання розв'язування молекулярних задач, метод Хартрі-Фока, метод лінійної комбінації атомних орбіталей, методи квантової хімії, що враховують електронну кореляцію, моделювання молекул у збуджених станах і розчинах. Курс передбачає виконання переліку завдань з дослідження фізичних і хімічних властивостей молекул, зокрема біомолекул, в програмному комплексі Gaussian з використанням графічного інтерфейсу GaussView.

4. Завдання (навчальні цілі) – вивчення теоретичних підходів до квантово-механічного опису молекул. Вивчення методів, які застосовуються у комп'ютерній фізиці молекул. Отримання практичних вмінь дослідження фізичних та хімічних властивостей молекул, зокрема біомолекул, в програмному комплексі Gaussian з використанням графічного інтерфейсу GaussView.

Згідно освітньо-наукової програми дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних *компетентностей*:

загальних:

- Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. (ЗК1).
- Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології. (ЗК5).

спеціальних:

- Здатність використовувати закони та принципи фізики та/або астрономії у поєднанні із потрібними математичними інструментами для опису природних явищ. (СК1).
- Здатність формулювати, аналізувати та синтезувати рішення наукових проблем в області фізики та/або астрономії. (СК2).
- Здатність аналізувати, вибирати і застосовувати чисельні та аналітичні методи для відповідних розрахунків в галузі медичної фізики. (СК12).

5. Результати навчання за дисципліною:

<i>Результат навчання</i> (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
Код	Результат навчання			
1	1.1 Знати постулати квантової механіки, властивості самоспряжених операторів. Молекулярне рівняння Шрьодінгера, електронний гамільтоніан. Адіабатичне наближення та	Лекція	Екзамен	10

	наближення Борна-Опенгаймера. Поняття поверхні потенціальної енергії молекули. Розподіл заселеності конформерів. Матрицю Гессе, масштабні множники для коливальних спектрів.			
	1.2 Знати загальні властивості хвильових функцій багатоелектронних систем. Принцип Паулі, детермінант Слетера. Середнє значення електронного гамільтоніану, кулонівський та обмінний інтеграл. Варіаційний принцип. Рівняння Хартрі-Фока. Кулонівський та обмінний оператори. Теорему Купменса.	Лекція	Екзамен	10
	1.3 Знати обмежений та необмежений метод ХФ. Метод лінійної комбінації атомних орбіталей. Рівняння Рутана-Хола. Вирази для радіальної і кутової частин хвильової функції атома гідрогену. Енергію основного стану атома гідрогену на гауссовій функції. Базисні функції слетерівського та гауссового типів. Базисні функції Дж. Попла і їх властивості.	Лекція	Екзамен	10
	1.4 Знати поняття кореляційна енергія, метод конфігураційної взаємодії. Теорію функціоналу густини: теорему Хоенберга – Кона, метод Кона – Шама, кореляційно-обмінні функціонали. Термохімічний аналіз, поступальну, обертальну та коливальну складові теплоємності молекул. Знати методи моделювання молекул у розчинах. Напівемпіричні методи квантової хімії. Теорію збурень Меллера – Плессета. Метод зв'язаних кластерів	Лекція	Екзамен	10
2	2.1 Вміти виконувати оптимізацію геометрії молекули і знаходити її конформери. Аналізувати заселеність конформаційних станів. Обчислювати коливальні спектри молекул і знаходити перехідні стани, будувати сумарний спектр конформерів та ізотопологів. Виконувати сканування поверхні потенціальної енергії молекули.	Лекція, самостійна робота	Виконання індивідуальних самостійних завдань	20
	2.2. Вміти досліджувати фізичні та хімічні властивості іонів, обчислювати енергії іонізації та дисоціації молекул, а також спорідненість до електрона. Вміти використовувати різні квантово-хімічні методи та базисні набори.	Лекція, самостійна робота	Виконання індивідуальних самостійних завдань	20
	2.3 Вміти обчислювати електронні спектри молекул, та оптимізувати геометрію молекули у збудженому стані. Вміти використовувати періодичні граничні умови. Вміти досліджувати властивості молекул у розчинах. Вміти обчислювати термохімічні властивості молекул.	Лекція, самостійна робота	Виконання індивідуальних самостійних завдань	20

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін)

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни						
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3
ПРН06. Обирати ефективні математичні методи та інформаційні технології та застосовувати їх для здійснення досліджень та/або інновацій в області фізики та/або астрономії.	+	+	+	+			
ПРН11. Застосовувати теорії, принципи і методи фізики та/або астрономії для розв'язання складних міждисциплінарних наукових і прикладних задач.					+	+	+
ПРН13. Створювати фізичні, математичні і комп'ютерні моделі природних об'єктів та явищ, перевіряти їх адекватність, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, аналізувати обмеження.	+	+	+				
ПРН19. Знати і вміти застосовувати чисельні та аналітичні методи для відповідних розрахунків в галузі медичної фізики.	+	+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки:

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Виконання індивідуальних самостійних завдань: РН 2.1-2.3 – 60 балів / 30 балів.

- підсумкове оцінювання у формі екзамену:

Екзамен проводиться в письмово-усній формі і оцінює РН 1.1-1.4. Кожен екзаменаційний білет містить два теоретичні питання, на які необхідно дати у відповідь у письмовій формі, а потім пояснити в усній формі. На екзамені студент може отримати максимально 40 балів.

- умови допуску до підсумкового екзамену: набрати не менше 30 балів за семестрове оцінювання.

7.2 Організація оцінювання: (обов'язково зазначається порядок організації передбачених робочою навчальною програмою форм оцінювання із зазначенням орієнтовного графіку оцінювання).

На лекції студенти отримують індивідуальні завдання, які вони повинні самостійно виконати у програмному комплексі Gaussian з використанням графічного інтерфейсу GaussView і наступного тижня здають ці завдання. Всього 12 завдань, кожне з яких оцінюється у 5 балів. Якщо завдання не здано вчасно, то його можна здати на будь-якій наступній парі впродовж семестру.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни

Тематичний план лекцій та самостійних робіт

№ п/п	Номер і назва теми	Кількість годин	
		лекції	С/Р
1	Тема 1. Вступ. Постулати квантової механіки. Хвильова функція, оператори фізичних величин. Властивості ермітових операторів. Рівняння Шрьодінгера.	2	3
2	Тема 2. Знайомство з програмним пакетом Gaussian і графічним інтерфейсом GaussView. Вхідні та вихідні файли Gaussian. Оптимізація геометрії та енергія основного стану. С.Р.С. 1 Побудувати молекулу у GaussView. Виконати оптимізацію геометрії і порівняти зі структурою та енергією неоптимізованої молекули.	2	5
3	Тема 3. Молекулярне рівняння Шрьодінгера, електронний гамільтоніан. Адіабатичне наближення та наближення Борна-Опенгаймера.	2	3
4	Тема 4. Внутрішні координати молекули. Поверхня потенціальної енергії молекули: глобальні та локальні мінімуми, перехідні стани. Оптимізації геометрії молекули. Ізмери.	2	3
5	Тема 5. Критерії оптимізації геометрії у Gaussian. Пошук конформерів і заселеність конформаційних станів. С.Р.С. 2 Знайти три конформери молекули і розрахувати заселеність цих конформаційних станів	2	5
6	Тема 6. Матриця Гессе, нормальні координати і коливання, частоти власних коливань молекули. Коливальні спектри, масштабні множники.	2	3
7	Тема 7. Обчислення частот власних коливань молекул і візуалізація власних коливань. Побудова коливальних спектрів: інфрачервоного (ІЧ) поглинання на комбінаційного розсіяння світла (КРС). Масштабні множники. С.Р.С. 3 Обчислити частоти коливань молекули. Застосувати масштабування і експортувати дані у текстовий файл. Побудувати спектри ІЧ поглинання і КРС. С.Р.С. 4 Обрати два конформери (див. СРС 2), які відрізняються поворотом навколо одного одинарного зв'язку. Обчислити частоти коливань для кожного з них, знайти різницю частот власних коливань. Оптимізувати геометрію молекули до перехідного стану і обчислити частоти коливань, пересвідчитись, що у списку частот перша частота має від'ємне значення. Знайти висоту енергетичного бар'єру між конформерами. С.Р.С. 5 Обчислити коливальні спектри трьох конформерів. Порівняти спектри ІЧ поглинання конформерів і побудувати сумарний спектр, враховуючи заселеність конформаційних станів. Обчислити як змінюється спектр молекули при заміні одного з атомів вуглецю на ізотоп ^{13}C .	4	15
8	Тема 8. Загальні властивості хвильових функцій багаточастинкових систем. Одноелектронне наближення, детермінант Слетера, принцип Паулі.	2	3
9	Тема 9. Середнє значення електронного гамільтоніану на детермінанті Слетера. Кулонівський та обмінний інтегралі.	2	3
10	Тема 10. Сканування поверхні потенціальної енергії.	2	5

	С.Р.С. 6 Виконати сканування по двогранному куту і довжині зв'язку. Побудувати залежність енергії від координати (кута, довжини зв'язку).		
11	Тема 11. Варіаційний принцип, виведення рівняння Шрьодінгера варіаційним методом.	2	3
12	Тема 12. Виведення рівняння Хартрі-Фока. Оператори Фока, кулонівської та обмінної взаємодії. Метод самоузгодженого поля.	2	3
13	Тема 13. Теорема Купменса, енергія іонізації молекул. Спін електрона, матриці Паулі. Координатна і спінова частини хвильової функції. Обмежений та необмежений за спіном метод Хартрі-Фока	2	3
14	Тема 14. Дослідження властивостей іонів та аніонів у Gaussian (структура, коливальні спектри та інше). С.Р.С. 7 Виконати оптимізацію геометрії іона. Порівняти структури (довжини зв'язків, валентні та двогранні кути) іона та нейтральної молекули. Обчислити енергію іонізації молекули (різниця енергій іона і нейтральної молекули) із урахуванням поправки на енергію нульових коливань. Порівняти енергію іонізації з енергією найвищої зайнятої молекулярної орбіталі (перевірка теореми Купменса) та експериментальним значенням	2	5
15	Тема 15. Метод лінійної комбінації атомних орбіталей. Рівняння Рутана-Хола. Двоелектронні інтеграли. Розв'язування рівняння Рутана-Хола на прикладі молекули H ₂ .	2	3
16	Тема 16. Рівняння Шрьодінгера для атома гідрогену. Вирази для радіальної і кутової частин хвильової функції Квантові числа. Приведення радіальної частини гамільтоніана до знерозміреного вигляду.	2	3
17	Тема 17. Моделювання молекул у збуджених станах, природа оптичного спектру. Сила осцилятора. С.Р.С. 8 Обчислити оптичний спектр молекули. Оптимізувати геометрію молекули в основному і збудженому станах, порівняти їх будову (довжини зав'язків і кути).	2	5
18	Тема 18. Енергія основного стану атома гідрогену на 1s та гауссовій функції	2	3
19	Тема 19. Орбіталі Слетера-Зенера. Базисні функції гауссового типу, їх нормування. Згруповані базисні функції. Мінімальний базисний набір. Розширені базисні набори: валентно-розщеплені, поляризовані, дифузні .	2	3
20	Тема 20. Базисні функції Попла С.Р.С. 9 Виконати оптимізацію геометрії молекули методом Хартрі-Фока у різних базисах: STO-3G, 3-21G, 6-31G, 6-31G(d), 6-31G++(3df,3pd), і скласти таблицю для довжин зв'язків, валентних кутів, енергії основного стану та часу обчислень. Проаналізувати отримані результати.	2	5
21	Тема 21. Обмеженість одностермінантного наближення. Енергія електронної кореляції. Метод конфігураційної взаємодії.	2	3
22	Тема 22. Моделювання молекул у розчинах. С.Р.С. 10 Оптимізувати геометрію молекулу у розчині води і розрахувати коливальний спектр. Порівняти дипольний момент, геометрію молекули і частоти коливань з розчинником і без. Розрахувати оптичний спектр (UV-VIS) молекули з урахуванням розчинника і без, порівняти спектри.	2	5
23	Тема 23. Теорія функціоналу електронної густини: теорема Хоенберга-Кона, метод Кона-Шема. Наближення локальної густини	2	3

	та методи градієнтної корекції. Гібридні функціонали густини.		
24	Тема 24. Теорія збурень у квантовій механіці. Методи Меллера-Плессе (MP2, MP4). Багатоконфігураційні методи самоузгодженого поля.	2	3
25	Тема 25. Термохімічний аналіз, поступальна, обертальна та коливальна складові теплоємності молекул.	2	3
26	Тема 26. Обчислення термохімічних характеристик молекул у Gaussian. С.Р.С. 11 Обчислити залежність теплоємності від температури і побудувати графік цієї залежності. Обчислення провести не менше як для семи значень температури.	2	6
27	Тема 27. Напівемпіричні методи квантової хімії. Метод зв'язаних кластерів.	2	3
28	Тема 28. Використання періодичних граничних умов у Gaussian. С.Р.С. 12 Побудувати полімер в GaussView з використанням періодичних граничних умов і виконати оптимізацію геометрії.	2	5
29	Тема 29. Підсумкове заняття	2	5
	ВСЬОГО	60	120

Загальний обсяг 180 год⁴, в тому числі (вибрати необхідне):

Лекцій – **60 год.**

Самостійна робота – **120 год.**

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

Основна: (Базова)

1. Вакарчук І. О. Квантова механіка: підручник / І. О. Вакарчук. – 4-те вид., доп. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2012. – 872 с.
2. Минкин В. И. Теория строения молекул/ В. И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. – Ростов на Дону : «Феникс», 1997. – 550 с.
3. Hutter J. Lecture Notes in Computational Chemistry: Electronic Structure Theory / J. Hutter. – University of Zurich, 2005. – 152 p.
4. Барановский В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. – 3-е изд., стер. – Санкт-Петербург : Лань, 2019. — 428 с.
5. Foresman J. B. Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian, 3rd ed. / J. B. Foresman, A. Frisch – Wallingford: Gaussian Inc., 2015. – 531 p.
6. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е.В. Бутырская. – Москва: СОЛОН-ПРЕСС, 2011. – 218 с.

Додаткова:

7. Jensen F. Introduction to computational chemistry/ F. Jensen. – Wiley. – 2007. – 599 с.
8. GaussView Help
9. Попл Дж.А. Квантово-химические модели // УФН. – Т. 172 №3, – 2002. – с. 349.

⁴ Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.