

# Основы молекулярного моделирования

Тихонов Денис

канд.хим.наук, постдок в DESY (Гамбург, Германия).

<https://istina.msu.ru/profile/dentix/>

## Анонс

Современное молекулярное моделирование позволяет ответить на множество интересных вызовов: от предсказания свойств материалов (<https://doi.org/10.1371/journal.pone.0061179>) до вопросов о происхождении жизни (<https://doi.org/10.1038/nchem.2099>).

В этом курсе мы постараемся рассмотреть основные существующие методы молекулярного моделирования, разобрать их плюсы и минусы, а также попытаемся применить их на практике.

## Тематический план курса

1. Что такое молекула с точки зрения физики? Гамильтониан молекулы, виды движений в молекулах и их разделение.
2. Иерархия методов квантовой химии. Принцип Паули, метод Хартри-Фока и пост-Хартри-Фокские методы (MP, CI, CC), метод функционала плотности (DFT), полуэмпирические методы, молекулярная механика (MM), гибридные методы (QM/MM).
3. Модель жёсткого ротатора – гармонического осциллятора. Поступательное, вращательное и колебательное движения молекулы, виды волчков, гармонический осциллятор и нормальные колебания.
4. Основы статистической термодинамики. Понятие ансамблей, распределение Больцмана, эргодическая гипотеза.
5. Основы теоретической химической кинетики. Активированный комплекс, уравнение Эйринга-Поляни.
6. Метод Монте-Карло (МК). Наивный метод Монте-Карло и метод Метрополиса.
7. Метод Молекулярной Динамики (МД). Численное интегрирование уравнений движения, виды термостатов, построение простейших глобальных термостатов (наивное масштабирование скоростей, термостаты Берендсена, Андерсена, Нозе-Хувера).
8. Метадинамика.
9. Учёт квантовых эффектов в МК и МД. Термодинамический метод интегралов по траекториям.
10. Учёт неадиабатических эффектов в МК и МД. Метод минимального числа прыжков по траекториям, эренфестовская динамика.
11. Обзор программ для молекулярного моделирования.

## Объем курса и организация занятий

Курс рассчитан на 12 занятий (28 академических часов), занятия будут вестись дистанционно. Формат: лекционный, с обратной связью, для курса будет создана группа в Telegram для обсуждения практических вопросов решения задач. Занятия будут вестись на русском языке. Итоговая аттестация – через решение практических задач на своих персональных компьютерах/ноутбуках, их сдача будет происходить индивидуально или в маленьких группах, в формате коллоквиума.

## Информация для потенциальных слушателей

Курс является обзорным, но требующим базовых знаний классической, квантовой и статистической механики, поэтому приоритет будет отдаваться студентам и аспирантам, имеющим представление об этих дисциплинах (2й-3й курс и выше). Для решения практических задач потребуется персональный компьютер/ноутбук и умение с ним работать :)

## Список литературы

1. Ю.В. Новаковская, "Молекулярные системы: теория строения и взаимодействия с излучением" // М.: УРСС (2004) .
2. Ю.В. Новаковская, ч. II "Квантовые состояния молекул" // М.: УРСС (2004).
3. Д.Френкель, Б.Смит, "Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям" // М.: "Научный мир" (2013).
4. Барановский В.И., "Квантовая механика и квантовая химия" // М: "Академия" (2008).
5. F.Jensen, "Introduction to Computational Chemistry" // John Wiley & Sons, Inc (2007).
6. T.Schlick, "Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide" // Springer New York Dordrecht Heidelberg London (2010).
7. W.Krauth, "Statistical Mechanics. Algorithms and Computations" // Oxford University Press Inc. (2006).
8. M.Barbatti, "Nonadiabatic dynamics with trajectory surface hopping method" // *WIREs Comput Mol Sci* (2011), 1: 620-633. doi: 10.1002/wcms.64
9. DOI: 10.13140/RG.2.2.28797.20966/1