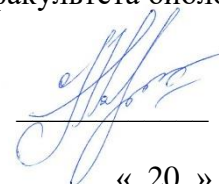


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Кафедра общей и физической химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А.Маракаев

« 20 » мая 2021 г.

Рабочая программа дисциплины
«Компьютерное моделирование термодинамики и кинетики процессов
в живых системах»

Направление подготовки
04.03.01 Химия

Направленность (профиль)
«Медицинская и фармацевтическая химия»

Форма обучения
очная

Программа одобрена
на заседании кафедры
от 14 мая 2021 г., протокол № 8

Программа одобрена НМК
факультета биологии и экологии
протокол № 7 от 17 мая 2021 г.

Ярославль

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование у студентов системы знаний и навыков, необходимых для проведения вычислительного эксперимента по моделированию термодинамики и кинетики химических процессов с участием биомолекул на базе численных методов.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится части, формируемой участниками образовательных отношений, блока 1 (Б1.В.ДВ.04.02).

Для освоения данной дисциплины студенты должны знать основы дисциплин «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Физико-химические методы анализа», «Основы квантовой механики и квантовой химии», а также, основные операции высшей математики (дифференцирование, интегрирование, решение дифференциальных уравнений), основы численных методов, владеть базовыми навыками работы на персональном компьютере.

Знания и навыки, полученные при изучении дисциплины, необходимы для выполнения выпускной работы, в научно-исследовательской деятельности, а также для продолжения обучения в магистратуре.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ОП ВО и приобретения следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

| Формируемая компетенция (код и формулировка) | Индикатор достижения компетенции (код и формулировка) | Перечень планируемых результатов обучения |
|---|--|--|
| Профессиональные компетенции | | |
| ПК-1 Способен проводить НИР и НИОКР, выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации. | ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР. | Знать: – теоретические основы статистического расчета термодинамических величин; – теоретические основы численного моделирования кинетики химических реакций. Уметь: – применять теоретические знания при планировании численного эксперимента (моделирования); Владеть навыками: – составления входных файлов и кинетических схем для проведения компьютерного моделирования термодинамики и кинетики. |
| | ПК-1.3 Выбирает технические средства реализации и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР. | Знать: – аналитические и численные методы решения прямой и обратной кинетических задач. Уметь: – выбирать наилучшие методы для моделирования термодинамики и кинетики биохимических процессов. Владеть навыками: – анализа достоинств и недостатков различных методов моделирования. |

| | | |
|--|--|---|
| | <p>ПК-1.5 Обрабатывает результаты экспериментальных и теоретических исследований.</p> | <p>Знать: – методы определения кинетических параметров на основе экспериментальных данных и результатов моделирования. Уметь: – определять кинетические параметры на основе результатов кинетического моделирования; – рассчитывать термодинамические параметры отдельных веществ и химических реакций с применением методов квантовой химии. Владеть навыками: – анализа результатов кинетического моделирования и квантово-химического расчета термодинамических параметров.</p> |
| <p>ПК-2 Способен осуществлять разработку методов получения и контроля соединений с целевыми характеристиками под руководством специалиста более высокой квалификации.</p> | <p>ПК-2.4 Способен изучать реакцию способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов.</p> | <p>Знать: – основные принципы, лежащие в основе компьютерного моделирования термодинамики и кинетики процессов в живых системах. Уметь: – осуществлять компьютерное моделирование термодинамики и кинетики биохимических процессов. Владеть навыками: – работы в специализированных программах для квантово-химических расчетов и моделирования кинетики биохимических реакций.</p> |

4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 7 зачетных единиц, 252 acad.ch.

| № п/п | Темы (разделы) дисциплины, их содержание | Семестр | Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах) | | | | | | Формы текущего контроля успеваемости Форма промежуточной аттестации (по семестрам) Формы ЭО и ДОТ (при наличии) |
|-------|---|---------|---|--------------|--------------|--------------|--------------------------|------------------------|---|
| | | | Контактная работа | | | | | | |
| | | | лекции | практические | лабораторные | консультации | аттестационные испытания | самостоятельная работа | |
| 1 | Основы статистической термодинамики. Понятие о функциях распределения и суммах по состояниям. | 7 | 22 | 27 | | 6 | | 30 | Опрос, расчетное задание |
| 2 | Компьютерное моделирование термодинамики и химического равновесия процессов в живых системах. | 7 | 15 | 27 | | 5 | | 28 | Опрос, контрольная работа № 1 |
| 3 | Моделирование кинетики биохимических процессов. | 7 | 17 | 27 | | 6 | | 29 | Опрос, контрольная работа № 2 |
| | | | | | | | 0,3 | 12,7 | Зачет |
| | ИТОГО | | 54 | 81 | | 17 | 0,3 | 99,7 | |

4.1 Информация о реализации дисциплины в форме практической подготовки

Информация о разделах дисциплины и видах учебных занятий, реализуемых в форме практической подготовки

| № п/п | Темы (разделы) дисциплины, их содержание | Семестр | Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах) | | | | | | Место проведения занятий в форме практической подготовки |
|-------|---|---------|---|--------------|--------------|--------------|--------------------------|------------------------|--|
| | | | Контактная работа | | | | | | |
| | | | лекции | практические | лабораторные | консультации | аттестационные испытания | самостоятельная работа | |
| 1 | Основы статистической термодинамики. Понятие о функциях распределения и суммах по состояниям. | 7 | | 27 | | | | | Факультет биологии и экологии ЯрГУ |
| 2 | Компьютерное моделирование термодинамики и химического равновесия процессов в живых системах. | 7 | | 27 | | | | | Факультет биологии и экологии ЯрГУ |
| 3 | Моделирование кинетики биохимических процессов. | 7 | | 27 | | | | | Факультет биологии и экологии ЯрГУ |
| | ИТОГО | | | 81 | | | | | |

Содержание разделов дисциплины

1. Основы статистической термодинамики

1.1 Основные постулаты статистической термодинамики.

1.2 Понятие о функциях распределения и суммах по состояниям. Статистические аналоги термодинамических величин.

1.3 Поступательная, электронная и ядерная составляющая суммы по состояниям. Вращательная составляющая суммы по состояниям. Колебательная составляющая суммы по состояниям.

2. Компьютерное моделирование термодинамики и химического равновесия процессов в живых системах.

2.1 Особые точки на ППЭ. Гессиан. Диагональные элементы гессиана и их связь с нормальными частотами колебаний. Поправки к частотам колебаний.

2.2 Квантово-химический расчет термодинамических функций. Учет различных вкладов в энтальпию.

Практическая работа № 1. Квантово-химический расчет энергий разрыва связи в биоантиоксидантах.

Практическая работа № 2. Квантово-химическое моделирование обратимого связывания кислорода с моделью гема.

3. Моделирование кинетики биохимических процессов

3.1 Прямая и обратная кинетические задачи. Кинетика сложных химических процессов. Метод квазистационарных концентраций.

3.2 Численное решение прямой кинетической задачи. Влияние параметров численного интегрирования на сходимость и точность решения. Сравнение решений аналитическими и численными методами для простых реакций.

3.3. Моделирование кинетики ферментативных реакций. Ферментативный катализ и ингибирование ферментов.

3.3 Моделирование кинетики сложных реакций. Моделирование кинетики цепных реакций в отсутствие и присутствии ингибитора.

3.4 Решение обратной кинетической задачи методом компьютерного моделирования.

Практическая работа № 3. Моделирование кинетики ферментативной реакции.

Практическая работа № 4. Моделирование кинетики цепной реакции окисления полиненасыщенных жирных кислот молекулярным кислородом.

Практическая работа № 5. Моделирование кинетики окисления полиненасыщенных жирных кислот в присутствии ингибиторов различных классов: фенолы, ионы металлов, нитроксильные радикалы.

5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

Академическая лекция (или лекция общего курса) – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя с применением мультимедийных презентаций. Требования к академической лекции: современный научный уровень и насыщенная информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, обоснований, фактов.

Практическое занятие – занятие, посвященное освоению конкретных умений и навыков и закреплению полученных на лекции знаний.

Консультации – групповые занятия, являющиеся одной из форм контроля самостоятельной работы студентов.

Для организации самостоятельной работы студентов и проведения текущего контроля успеваемости (в форме промежуточных и итогового теста) используются **дистанционные технологии** в виде электронного учебного курса (ЭУК) в системе Moodle ЯрГУ. В ЭУК имеются электронные конспекты лекций, задания к практическим занятиям, задания для самостоятельной работы. В ЭУК сохраняются оценки, полученные учащимися в процессе изучения курса.

6. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения, используемого при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе осуществления образовательного процесса используются:

- операционные системы семейства Microsoft Windows;
- программы Microsoft Office;
- программа Adobe Acrobat Reader;
- браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome;
- программа Firefly 8.0 (проведение квантово-химических расчетов, свободная лицензия, <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>);
- программа wxMacMolPlt 7.7 (визуализация результатов квантово-химических расчетов, свободная лицензия, <https://brettbode.github.io/wxmacmolplt/>).
- программа для численного моделирования кинетики сложных химических реакций «Кинетика 2012».

7. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (при необходимости)

1. NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase <http://cccbdb.nist.gov/>
2. NIST Chemical Kinetics Database. <https://kinetics.nist.gov/kinetics/>. База данных содержит информацию о константах скорости и энергиях активации элементарных реакций, протекающих в газовой фазе.
3. NIST Solution Kinetics Database. <https://kinetics.nist.gov/solution/>. База данных содержит информацию о константах скорости и энергиях активации элементарных реакций, протекающих в жидкой фазе.
4. Автоматизированная библиотечно-информационная система «БУКИ-NEXT» http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины

а) основная литература

1. Черепанов, В.А. Химическая кинетика : учебное пособие для вузов / В.А. Черепанов, Т.В. Аксенова. – Москва : Издательство Юрайт, 2021. – 130 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-10878-1. – Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. <https://urait.ru/bcode/493663>
2. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч.

Часть 1. Квантовая механика : учебник и практикум для вузов / А.И. Ермаков. – Москва : Издательство Юрайт, 2021. – 183 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-00127-3. – Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. – URL: <https://urait.ru/bcode/471665>

Часть 2. Квантовая химия : учебник и практикум для вузов / А.И. Ермаков. – Москва : Издательство Юрайт, 2021. – 402 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-00128-0. – Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. – URL: <https://urait.ru/bcode/471666>

б) дополнительная литература

1. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия. – М.: Академия, 2008. – 383 с. ISBN 978-5-7695-3961-9.

http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1219858&cat_cd=YARSU

2. Тихонов И.В. Химическая кинетика [Электронный ресурс]: практикум. / И.В. Тихонов, А.В. Сирик, А.М. Гробов; Яросл. гос. ун-т им. П.Г. Демидова – Ярославль: ЯрГУ, 2020. – 48 с. <http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20200303.pdf>

3. Ефремов, Ю.С. Статистическая физика и термодинамика : учебное пособие для вузов / Ю.С. Ефремов. – 2-е изд., испр. и доп. – Москва : Издательство Юрайт, 2022. – 209 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-05152-0. – Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. – URL: <https://urait.ru/bcode/492840>

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения практических занятий (семинаров);
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории (ноутбук и/или персональный компьютер, мультимедиа-проектор, настенный проекционный экран).

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, хранящиеся на электронных носителях и обеспечивающие тематические иллюстрации, соответствующие рабочей программе дисциплины.

Для проведения квантово-химических расчетов и кинетического моделирования используется компьютерная техника, позволяющая осуществлять такие расчеты (персональные компьютеры и/или ноутбуки).

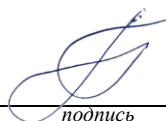
Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Число посадочных мест в лекционной аудитории больше либо равно списочному составу потока, а в аудитории для практических занятий (семинаров) – списочному составу группы обучающихся.

Автор:

Доцент кафедры общей и физической химии, к.х.н.

должность, ученая степень



подпись

А.М. Гробов
И.О. Фамилия

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины
«Компьютерное моделирование термодинамики и кинетики процессов
в живых системах»**

**Фонд оценочных средств
для проведения текущего контроля успеваемости
и промежуточной аттестации студентов
по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания и иные материалы,
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

**Задания для самостоятельной работы
(проверка осуществляется путем опроса)**

Задания по теме № 1 «Основы статистической термодинамики»

1. Раздел 1.1. В сосуде находится 1 моль а) гелия, б) азота. Чему равно число степеней свободы такой системы. Какова размерность фазового пространства?

Постройте фазовую траекторию для тела массы m , которое движется под действием упругой силы $F = -kx$ вдоль прямой линии.

2. Раздел 1.2. В некоторой молекуле есть три электронных уровня энергии: 0, 1500 и 2800 см^{-1} . Нижний уровень невырожден, средний – трехкратно вырожден, высший – пятикратно вырожден. Найдите среднюю электронную энергию молекулы и заселенность каждого уровня при 2000 К.

3. Раздел 1.3. Сравните мольные теплоемкости газообразных воды и углекислого газа при 300 К в предположении, что вкладами электронных и колебательных движений можно пренебречь.

При каком значении вращательного квантового числа заселенность вращательного уровня в основном электронно-колебательном состоянии молекулы S_2 ($B = 0.296 \text{ см}^{-1}$) максимальна при температуре 300 К?

Рассчитайте молекулярную вращательную сумму по состояниям Q_{rot} и вращательные вклады в мольные энтропию и приведенную энергию Гиббса для молекулярного фтора при 1500 К. Вращательная постоянная F_2 равна $B = 0.89 \text{ см}^{-1}$.

Рассчитайте молекулярную поступательную сумму по состояниям Q_{transl} и поступательные вклады в мольные энтропию и приведенную энергию Гиббса для молекулярного фтора F_2 при температуре 2000 К и давлении 1 атм.

Определите среднюю скорость и наиболее вероятную скорость атомов гелия при температуре 300 К.

Определите число симметрии для молекулы циклобутана.

Рассчитайте молекулярную колебательную сумму по состояниям Q_{vib} и колебательный вклад в мольную приведенную энергию Гиббса для оксида углерода (IV) при 500 К. Частоты колебаний: $\nu_1 = 1388.2 \text{ см}^{-1}$, $\nu_2 = 667.4 \text{ см}^{-1}$ (двукратное вырождение), $\nu_3 = 2349.2 \text{ см}^{-1}$.

Вычислите мольную теплоемкость газообразной окиси азота NO при $T = 300 \text{ К}$. Разность энергий основного и первого возбужденного электронных состояний равна

$(\epsilon_1 - \epsilon_0) / k = \epsilon / k = 172 \text{ К}$, статистические веса состояний $g_0 = 2$, $g_1 = 4$, межъядерное расстояние равно $1.1508 \cdot 10^{-8} \text{ см}$. Вращательное движение молекул описать классически, колебательные степени свободы не учитывать.

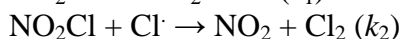
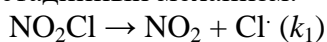
Задания по теме № 2 «Компьютерное моделирование термодинамики и химического равновесия процессов в живых системах»

1. Раздел 2.1. Смоделируйте молекулы аденина, цистеина, L-глюкопиранозы и рассчитайте для них гессиан. Соотнесите частоты колебаний с их типом.

2. Раздел 2.2. Смоделируйте молекулы глицина, тимина, аскорбиновой кислоты и рассчитайте для них гессиан. Рассчитайте энтальпию и энтропию данных молекул при 310 К.

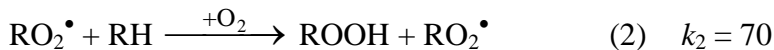
Задания по теме № 3 «Моделирование кинетики биохимических процессов»

1. Раздел 3.1. Для реакции $\text{NO}_2\text{Cl} \rightarrow \text{NO}_2 + 1/2\text{Cl}_2$ предложен следующий двухстадийный механизм:



Используя метод квазистационарных концентраций, выведите уравнение для скорости разложения NO_2Cl .

2. Раздел 3.3. Введение в окисляющуюся линолевую кислоту (RH) производных гидрохинона (QH_2) тормозит процесс окисления, вследствие чего на кинетической кривой появляется период индукции (τ), который связан с концентрацией ингибитора и скоростью инициирования соотношением $\tau = f[\text{InH}]/W_i$, где f – стехиометрический коэффициент ингибирования, который для ингибиторов класса фенолов равен 2. Данный процесс может быть описан кинетической схемой:



Феноксильные радикалы $\text{QH} \cdot$ способны взаимодействовать с кислородом по реакции (10) с образованием радикала $\text{HO}_2 \cdot$, который в представленной кинетической схеме окисления заменен на $\text{RO}_2 \cdot$. Данная реакция ведет к продолжению кинетической цепи окисления, поэтому эффективность ингибирования снижается. Значения k_{10} для различных гидрохинонов могут варьироваться от 0 до $1 \cdot 10^4$. На основании моделирования данной схемы исследовать:

1) Зависимость величины отношения периодов индукции τ/τ_0 (где τ_0 – период индукции при $k_{10} = 0$, τ – период индукции при произвольном k_{10}) от величины k_{10} (моделирование провести для $k_{10} = 0, 100, 300, 1000, 3000, 10000$).

2) Зависимость начальной скорости (W_2) окисления от величины k_{10} (для тех же значений k_{10}).

При моделировании принять $[\text{RH}] = 3$, $[\text{QH}_2] = 1 \cdot 10^{-5}$, $[\text{O}_2] = 1,5 \cdot 10^{-3}$.

Расчетное задание

(варианты индивидуальны для каждого студента, приведены примеры двух вариантов)

Вариант 1

Рассчитать энтропию S° , высокотемпературную составляющую энтальпии $H^\circ_T - H^\circ_{298}$ и теплоемкость C_p° вещества в состоянии идеального газа при давлении 1 бар = $1 \cdot 10^5$ Па и различных температурах. Сравнить результаты расчета со справочными данными (в графической форме).

O_2 $\omega = 1579.8 \text{ см}^{-1}$, $B = 1.447 \text{ см}^{-1}$, $\rho_0 = 3$.

<http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7782447&Units=SI&Mask=1&Type=JANAFG&Table=on#JANAFG>

Вариант 2

Рассчитать энтропию S° , высокотемпературную составляющую энтальпии $H^\circ_T - H^\circ_{298}$ и теплоемкость C_p° вещества в состоянии идеального газа при давлении 1 бар $= 1 \cdot 10^5$ Па и различных температурах. Сравнить результаты расчета со справочными данными (в графической форме).

NO $\omega = 1904.4 \text{ см}^{-1}$, $B = 1.705 \text{ см}^{-1}$, $\rho_0 = 4$.

<http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C10102439&Units=SI&Mask=1&Type=JANAFG&Table=on#JANAFG>

Контрольная работа № 1

(приведены примеры двух вариантов,
каждый студент получает индивидуальное задание)

Вариант 1

1. Не проводя вычислений, сравните теплоемкости C_V оксида азота N_2O и оксида углерода CO_2 при 100 К и 1000 К с использованием следующих молекулярных постоянных:

| Молекула | Частоты колебаний (см^{-1}) | | | $B, \text{см}^{-1}$ |
|----------|--|-------------------|---------|---------------------|
| | ν_1 | ν_2 | ν_3 | |
| CO_2 | 1334 | 667 ($d_2 = 2$) | 2350 | 0,390 |
| N_2O | 1277 | 588 ($d_2 = 2$) | 2223 | 0,419 |

2. По данным первой задачи рассчитайте молекулярную вращательную сумму по состояниям и вращательную составляющую энтропии для молекулы CO_2 при 300 К.

3. По данным первой задачи рассчитайте колебательную сумму по состояниям и колебательную составляющую теплоемкости C_p для молекулы N_2O при 1000 К.

4. Смоделируйте молекулу аланина. Рассчитайте энтальпию, энтропию и энергию Гиббса данной молекулы при 310 К.

Вариант 2

NO $\omega = 1904.4 \text{ см}^{-1}$, $B = 1.705 \text{ см}^{-1}$, $\rho_0 = 4$.

Для представленной молекулы найдите:

1. Вероятность нахождения молекулы на первом возбужденном колебательном уровне при 2000 К.

2. Молекулярную поступательную сумму по состояниям и поступательную составляющую энергии Гельмгольца при 400 К и давлении 1 атм.

3. Молекулярную колебательную сумму по состояниям и колебательную составляющую энтальпии при 1500 К.

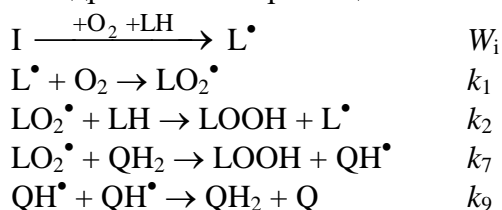
4. Смоделируйте молекулу витамина Е. Рассчитайте энергию разрыва связи О-Н в данной молекуле при 310 К.

Контрольная работа № 2

(каждый студент получает индивидуальное задание)

Задание 1.

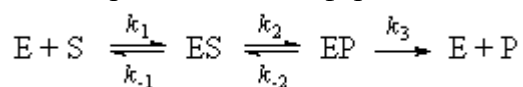
Механизм окисления линолевой кислоты (LH), ингибированного гидрохиноном (QH_2) при отсутствии квадратичного обрыва цепей описывается упрощенной схемой:



Выведите кинетическое уравнение для скорости процесса ингибированного окисления. Определите порядки реакции по линолевой кислоте, гидрохинону, кислороду и инициатору.

Задание 2.

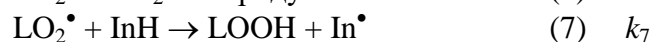
Рассмотрите механизм ферментативного катализа с двумя промежуточными комплексами:



Используя метод квазистационарных концентраций и уравнение материального баланса, покажите, что скорость реакции описывается уравнением типа Михаэлиса-Ментен. Найдите выражения для эффективной максимальной скорости и эффективной константы Михаэлиса через константы скорости отдельных стадий.

Задание 3.

Введение в окисляющуюся линолевую кислоту (LH) ингибитора (InH) тормозит процесс окисления, вследствие чего на кинетической кривой появляется период индукции (τ), который связан с концентрацией ингибитора и скоростью иницирования соотношением $\tau = f[\text{InH}]/W_i$, где f – стехиометрический коэффициент ингибирования, который для ингибиторов класса фенолов равен 2. Данный процесс может быть описан кинетической схемой:



На основании моделирования данной схемы исследовать зависимость ошибки, возникающей при определении периода индукции по методу касательной, от силы ингибитора (величины k_7). Моделирование провести для следующих значений k_7 : $1 \cdot 10^5$, $3 \cdot 10^5$, $1 \cdot 10^6$, $3 \cdot 10^6$ при скоростях иницирования $W_i = 1 \cdot 10^{-8}$ и $1 \cdot 10^{-7}$ (использовать $[\text{InH}] = 1 \cdot 10^{-5}$ и $1 \cdot 10^{-4}$ соответственно). $[\text{LH}] = 3$, $[\text{O}_2] = 0,0015$. Сделать вывод, при какой W_i лучше проводить измерение периода индукции в эксперименте.

Критерии оценивания результатов текущего контроля успеваемости

| Форма текущего контроля успеваемости | Правила выставления оценки |
|---------------------------------------|---|
| Опрос | <ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется за полный ответ на поставленный вопрос с включением в содержание ответа рассказа (лекции) преподавателя, материалов учебников, дополнительной литературы без наводящих вопросов; полное выполнение задания. - <i>Хорошо</i> выставляется за полный ответ на поставленный вопрос в объеме рассказа (лекции) преподавателя с включением в содержание ответа материалов учебников с четкими положительными ответами на наводящие вопросы преподавателя; выполнение задания с незначительными ошибками. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется за ответ, в котором озвучено более половины требуемого материала, с положительным ответом на большую часть наводящих вопросов; или обучающийся приступил к выполнению задания, наметил алгоритм решения, но допустил серьезные ошибки на этапах решения. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется за ответ, в котором озвучено менее половины требуемого материала или не озвучено главное в содержании вопроса с отрицательными ответами на наводящие вопросы, или обучающийся отказался от ответа без предварительного объяснения уважительных причин; или обучающийся не приступил к выполнению задания или не смог выработать алгоритм его решения. |
| Контрольная работа, расчетное задание | <ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется, если обучающийся выполнил работу (общий процент выполнения заданий не менее 90%), демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме работы, даёт правильный алгоритм решения. - <i>Хорошо</i> выставляется, если обучающийся выполнил работу с небольшими недочетами (общий процент выполнения заданий не менее 70%), демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме работы, допуская незначительные неточности при их применении и выборе алгоритма решения. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся в целом выполнил работу (общий процент выполнения заданий не менее 50%), допуская существенные недочеты, в том числе при выборе алгоритма решения. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся не справился с выполнением задания (общий процент выполнения заданий менее 50%), не смог выбрать алгоритм его решения, продемонстрировав существенные пробелы в знаниях основного учебного материала. |

Фонды оценочных средств по дисциплине предусматривают проверку индикаторов достижения компетенций

2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

Список вопросов к зачету

(зачет выставляется по результатам собеседования со студентом при условии успешного выполнения расчетного задания и контрольных работ № 1 и 2)

1. Статистическое описание термодинамических систем с применением классического и квантового подходов.
2. Основные постулаты статистической термодинамики. Теорема Лиувилля.
3. Сумма по состояниям, ее определение для дискретных и непрерывных распределений.
4. Распределение Больцмана. Плотность вероятности.
5. Квантовые статистики (Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака).
6. Статистические аналоги термодинамических величин.
7. Поступательная составляющая суммы по состояниям.
8. Электронная и ядерная составляющая суммы по состояниям.
9. Статистические аналоги термодинамических величин для одноатомного идеального газа.
10. Жесткий ротатор. Вращательная составляющая суммы по состояниям.
11. Гармонический осциллятор. Колебательная составляющая суммы по состояниям.
12. Расчет статистических сумм и термодинамических параметров квантово-химическими методами.
13. Учет вкладов различных видов движения в энтальпию.
14. Компьютерное моделирование термодинамики биохимических процессов.
15. Компьютерное моделирование равновесия в биохимических процессах.
16. Кинетика сложных химических процессов. Метод квазистационарных концентраций.
17. Методы численного решения прямой кинетической задачи.
18. Влияние параметров численного интегрирования на сходимость и точность решения.
19. Моделирование кинетики последовательно-параллельной реакции.
20. Моделирование кинетики неразветвленной цепной реакции неингибированного окисления липидов при различных концентрациях кислорода.
21. Моделирование кинетики ингибированной цепной реакции окисления липидов.
22. Моделирование кинетики вырождено-разветвленной цепной реакции автоокисления липидов.
23. Моделирование кинетики ферментативной реакции.
24. Методы решения обратной кинетической задачи с использованием компьютерного моделирования.

Правила выставления оценки на зачете

Критерием допуска к зачету является выполнение всех мероприятий текущей аттестации на оценку не ниже, чем «удовлетворительно». Устный ответ на зачете оценивается по 2-х балльной системе.

Отметка «**зачтено**» ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;
- студент свободно владеет научной терминологией;
- ответ студента структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов по вопросу билета;
- логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ иллюстрируется примерами, в том числе из собственной практики;

- студент демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию.

Отметка «**незачтено**» ставится, если:

- обнаружено незнание или непонимание студентом сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов билета не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые студент не может исправить самостоятельно;
- на большую часть дополнительных вопросов по содержанию зачета студент затрудняется дать ответ или не дает верных ответов.

Приложение №2 к рабочей программе дисциплины «Компьютерное моделирование термодинамики и кинетики процессов в живых системах»

Методические указания для студентов по освоению дисциплины

Основной формой изложения учебного материала по дисциплине «Компьютерное моделирование термодинамики и кинетики процессов в живых системах» являются лекции с применением презентаций. Это связано с тем, что изучаемый курс содержит большое количество формул и схем. Лекционный курс предоставляется студенту в электронном виде. Вместе с тем необходимо учитывать, что в ходе лекции многие примеры разбираются и иллюстрируются преподавателем на доске. Без конспектирования данных записей невозможно освоить курс в полном объеме. В процессе изучения дисциплины рекомендуется регулярное повторение пройденного лекционного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо дома еще раз прорабатывать и при необходимости дополнять информацией, полученной на консультациях, практических занятиях или из учебной литературы. Большое внимание должно быть уделено выполнению домашней работы. В качестве заданий для самостоятельной работы дома студентам предлагаются задачи, аналогичные разобранным на лекциях или немного более сложные, которые являются результатом объединения нескольких базовых задач. Освоить вопросы, излагаемые в процессе изучения дисциплины самостоятельно студенту крайне сложно, поэтому посещение всех аудиторных занятий является совершенно необходимым.

Полученные на лекциях теоретические знания закрепляются и применяются на практических занятиях, посвященных моделированию термодинамических свойств биомолекул с применением методов квантовой химии и кинетики биохимических процессов с использованием численных методов. Также студенты должны дополнительно осуществлять подобные расчеты самостоятельно, что должно помочь лучше освоить изучаемый курс, а также развить умения и навыки, которые пригодятся при выполнении выпускной квалификационной работы. Кроме того, в рамках практических занятий происходит разбор основных аналитических задач, которые могут позволить лучше понять изучаемый материал.

Для проверки и контроля усвоения теоретического материала и приобретенных практических навыков в течение обучения проводятся мероприятия текущей аттестации в виде расчетного (домашнего) задания и двух самостоятельных работ. Также проводятся консультации (при необходимости) по разбору заданий для самостоятельной работы, которые вызвали затруднения. В конце семестра студенты сдают зачет, который выставляется по результатам устного собеседования при условии успешного прохождения всех мероприятий текущей аттестации.

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине

Для самостоятельной работы рекомендуется использовать литературу, указанную в разделе 8 данной программы.

Для самостоятельного подбора литературы рекомендуется использовать:

1. http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ: более 3000 полных текстов учебных и учебно-методических материалов по основным изучаемым дисциплинам, изданных в университете.
2. <https://urait.ru/> Электронно-библиотечная система «Юрайт»: мультидисциплинарный ресурс (учебная, научная и художественная литература, периодика)
3. <http://window.edu.ru/catalog> Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам": свободный доступ к интегральному каталогу образовательных интернет-ресурсов и к электронной библиотеке учебно-методических материалов для общего и профессионального образования.