

Учебно-методическое объединение по  
классическому университетскому образованию РФ

«Согласовано»:

---

Директор Института проблем экологии  
и эволюции РАН им. А.Н. Северцова,  
академик РАН Д.С. Павлов

«Утверждаю»

---

Председатель Совета УМО  
по классическому университетскому  
образованию  
академик РАН В.А. Садовничий

**Примерная  
основная образовательная программа  
высшего профессионального образования**

**по направлению подготовки  
020400 Биология**

утверждено приказом Минобрнауки России от 17 сентября 2009 г. № 337.

ФГОС ВПО утвержден приказом Минобрнауки России от 04 февраля 2010 г. № 100

Квалификация (степень) выпускника - **Магистр**

Нормативный срок освоения программы - 2 года

Форма обучения - очная

## **1. Требования к результатам освоения основной образовательной программы**

Магистр по направлению подготовки 020400 – Биология в соответствии с целями основной образовательной программы и задачами профессиональной деятельности, указанными в ФГОС ВПО по данному направлению, должен иметь следующие компетенции:

### **Требования к результатам освоения ООП.**

Выпускник данной магистерской программы должен обладать **всеми компетенциями, соответствующими квалификации магистра биологии:**

ОК-1: способен к творчеству (креативность) и системному мышлению;

ОК-2: способен к инновационной деятельности;

ОК-3: способен к адаптации и повышению своего научного и культурного уровня;

ОК-4: понимает пути развития и перспективы сохранения цивилизации, связь геополитических и биосферных процессов, проявляет активную жизненную позицию, используя профессиональные знания;

ОК-5: проявляет инициативу, в том числе в ситуациях риска, способен брать на себя всю полноту ответственности способен к поиску решений в нестандартных ситуациях;

ОК-6: способен самостоятельно приобретать с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения, в том числе в новых областях знаний, непосредственно не связанных со сферой деятельности.

б) профессиональные (ПК): (указываются по видам деятельности)

общепрофессиональные:

Выпускник-магистр:

ПК-1: понимает современные проблемы биологии и использует фундаментальные биологические представления в сфере профессиональной деятельности для постановки и решения новых задач.

ПК-2: знает и использует основные теории, концепции и принципы в избранной области деятельности, способен к системному мышлению.

ПК-3: самостоятельно анализирует имеющуюся информацию, выявляет фундаментальные проблемы, ставит задачу и выполняет полевые, лабораторные биологические исследования при решении конкретных задач по специализации с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств, демонстрирует ответственность за качество работ и научную достоверность результатов.

ПК-4: демонстрирует знание истории и методологии биологических наук, расширяющие общепрофессиональную, фундаментальную подготовку.

ПК-5: демонстрирует знание основ учения о биосфере, понимание современных биосферных процессов, способность к их системной оценке, способность прогнозировать последствия реализации социально-значимых проектов.

ПК-6: творчески применяет современные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации.

ПК-7: понимает и глубоко осмысливает философские концепции естествознания, место естественных наук в выработке научного мировоззрения.

ПК-8: использует навыки организации и руководства работой профессиональных коллективов, способен к междисциплинарному общению и к свободному деловому общению на русском и иностранных языках, работе в международных коллективах.

ПК-9: профессионально оформляет, представляет и докладывает результаты научно-исследовательских и производственно-технологических работ по утвержденным формам.

**В соответствии с видами деятельности:**

***Научно-исследовательская:***

ПК-10: глубоко понимает и творчески использует в научной и производственно-технологической деятельности знания фундаментальных и прикладных разделов специальных дисциплин магистерской программы.

ПК-11: умеет планировать и реализовывать профессиональные мероприятия (в соответствии с целями магистерской программы).

ПК-12: применяет методические основы проектирования и выполнения полевых и лабораторных биологических и экологических исследований с использованием современной аппаратуры и вычислительных комплексов (в соответствии с целями магистерской программы), генерирует новые идеи и методические решения.

ПК-13: самостоятельно использует современные компьютерные технологии для решения научно-исследовательских и производственно-технологических задач профессиональной деятельности, для сбора и анализа биологической информации.

***Научно-производственная и проектная деятельность:***

ПК-14: использует знание нормативных документов, регламентирующих организацию и методику проведения научно-исследовательских и производственно-технологических биологических работ (в соответствии с целями магистерской программы), способен руководить рабочим коллективом, обеспечивать меры производственной безопасности, готов осуществлять проектирование и контроль биотехнологических процессов;

***Организационная и управленческая деятельность:***

ПК-15: планирует и проводит мероприятия по оценке состояния и охране природной среды в соответствии со специализацией, планирует и организует мероприятия по рациональному природопользованию, оценке и восстановлению биоресурсов;

***Педагогическая деятельность:***

ПК-16: имеет навыки формирования учебного материала, чтения лекций, готов к преподаванию в высшей школе и руководству НИР студентов, умеет представлять учебный материал в устной, письменной и графической форме для различных контингентов слушателей.

По окончании освоения программы «Биоинженерия и менеджмент научных исследований и высоких технологий» выпускник должен продемонстрировать также ряд специальных компетенций (СК):

СК-1: владеть предметной областью разработки эффективных методов изучения структурных, динамических и функциональных свойств физиологически активных веществ;

СК-2: владеть методами их использования для решения практических задач биомедицины, сельского хозяйства, биотехнологии и нанотехнологии;

СК-3: владеть навыками организации и управления производствами инновационного типа;

СК-4: оперировать знаниями молекулярной, белковой, метаболической, клеточной инженерии;

СК-5: владеть средствами молекулярной диагностики; знать молекулярные основы nano-биотехнологий;

СК-6: знать основы охраны интеллектуальной собственности;

СК-7: иметь представление о финансовой и хозяйственной деятельности инновационных предприятий, об основах управления инновационными проектами.

## 2. ПРИМЕРНЫЙ УЧЕБНЫЙ ПЛАН

подготовки магистра по направлению подготовки 020400 Биология

Квалификация (степень) - магистр  
Нормативный срок обучения – 2 года

№ п/п	Наименование дисциплин (в том числе практик)	Зачетные единицы	Академические часы	Примерное распределение по семестрам				
		Трудовое количество по ФГОС	Трудовое количество	1-й семестр	2-й семестр	3-й семестр	4-й семестр	Форма промежуточной аттестации
				Количество недель				
1	2	3	4	5	6	7	8	9
<b>М.1 Общенаучный цикл</b>		<b>23</b>	<b>828</b>					
	<b>Базовая часть</b>	<b>9</b>	<b>324</b>					
1.	Компьютерные технологии в науке и образовании	2	72	+				
2.	Философия естествознания	2	72	+				
3.	Иностранный язык	3	108	+	+			
4.	Экономика и менеджмент высоких технологий	2	72		+			
	<b>Вариативная часть, в т.ч. дисциплины по выбору студента</b>	<b>14</b>	<b>504</b>	+	+	+		
	<b>Дисциплины по выбору студента</b>							
	(Перечень курсов по выбору определяется вузом в соответствии с каждой магистерской программой)							
<b>М.2 Профессиональный цикл</b>		<b>36</b>	<b>1296</b>					
	<b>Базовая часть</b>	<b>8</b>	<b>288</b>					
1.	Современные проблемы биологии	3	108	+	+	+		

2.	Учение о биосфере и глобальные экологические проблемы	3	108	+				
3.	История и методология биологии	2	72		+			
	<b>Вариативная часть</b> , в т.ч. дисциплины по выбору студента	<b>28</b>	<b>1008</b>	+	+	+	+	
	<i>(Перечень вариативных дисциплин определяется вузом в соответствии с содержанием каждой магистерской программы), например:</i>							
	<b>Аннотированные Магистерские программы направления Биология:</b> Общая биология, Антропология, Зоология позвоночных, Зоология беспозвоночных, Ботаника, Микология, Физиология человека и животных, Физиология растений, Генетика, Биофизика, Биохимия и молекулярная биология, Микробиология и вирусология, Экология, Биология клетки, Биология развития, Нейробиология, Психофизиология, Иммунология, Гистология, Медико-биологические науки, Альгология, Энтомология, Гидробиология и ихтиология, Биоинженерия, Биоинженерия и менеджмент научных исследований и высоких технологий, Биотехнология.							
	<b>М.3 Практика и научно-исследовательская работа</b>	<b>51</b>	<b>1836</b>	+	+	+	+	
	<b>М.4 Итоговая государственная аттестация</b>	<b>10</b>	<b>360</b>					
	Подготовка и защита магистерской ВКР	10	360				+	Защита ВКР
	<b>Всего:</b> <i>(указывается в соответствии с ФГОС)</i>	<b>120</b>	<b>4320</b>					

В колонках 5-8 символом «×» указываются семестры для данной дисциплины; в колонке 9– форма промежуточной аттестации (итогового контроля по дисциплине)

### **3. Примерные программы дисциплин базовой части общенаучного цикла**

#### **1. Современные проблемы биологии**

**Требования к результатам освоения:** формирует компетенции ПК-1, ПК-2, ПК-3

**Содержание:** Актуальные проблемы, методологические достижения и перспективные направления наук о биологическом многообразии, физиологии, молекулярной и клеточной биологии, биологии развития, генетики, антропологии, экологии, теоретической биологии, эволюционной теории.

#### **2. История и методология биологии**

**Требования к результатам освоения:** формирует компетенции ПК-3, ПК-4.

**Содержание:** История возникновения и развития биологии и смежных с ней наук; основные понятия и категории; методологические аспекты биологических наук и их приложений; место биологии в системе научного знания, международные связи; роль выдающихся ученых в развитии биологических наук; зарождение новых научных направлений.

#### **3. Компьютерные технологии в науке и образовании**

**Требования к результатам освоения:** формирует компетенции ОК-6, ПК-6, ПК-13.

**Содержание:** Структура аудио и видеосредств и методика их применения; ПЭВМ, практические навыки работы с компьютером; телекоммуникационные системы; принципы построения автоматизированных систем обучения и контроля знаний; применение пакетов прикладных программ в учебном процессе; текстовые и графические редакторы, электронные таблицы, базы данных, информационные сети, геоинформационные системы.

#### **4. Философские проблемы естествознания**

**Требования к результатам освоения:** формирует компетенции ОК-7, ПК-7.

**Содержание:** Основные понятия философии естествознания: субстанция, материя, энергия, информация, пространство, время, жизнь, развитие, закон, природа; проблемы познания связей и закономерностей явлений природы; история развития натурфилософских представлений; современная естественнонаучная картина мира, место в ней наук о жизни; синергетика как универсальный язык описания эволюционирующей вселенной; философские проблемы теории познания в естественных науках.

#### **5. Иностранный язык**

**Требования к результатам освоения:** формирует компетенцию ПК-8.

**Содержание:** Лексико-грамматический материал для профессионального и бытового общения и чтения научной литературы; реферирование и аннотирование научной литературы; навыки научно-технического перевода

#### **6. Учение о биосфере и глобальные экологические проблемы**

**Требования к результатам освоения:** формирует компетенции ОК-4, ПК-5.

Эволюция биосферы; В.И. Вернадский и космологический смысл его учения; современное развитие биосферологии; взаимодействия природы и общества; антропогенное влияние на биосферу; глобальные экологические проблемы; методы прикладной экологии; экология человека в аспекте целостных представлений о биосфере.

## Список разработчиков ПООП, экспертов

### Разработчики:

МГУ имени М.В.Ломоносова, Биологический факультет	декан, Председатель УМС по биологии УМО по классическому уни- верситетскому образова- нию, академик РАН ведущий научный со- трудник профессор доцент	М.П. Кирпичников
Воронежский ГУ, Биоло- гический факультет	декан, профессор	О.П. Мелехова, А.И. Ким, Г.С. Сухова
Институт биологии разви- тия РАН	директор ИБР РАН, про- фессор	В.Г. Артюхов Озернюк Н.Д.

### Эксперты:

Институт проблем экологии и эво- люции РАН им. А.Н. Северцова,	Член-корреспондент РАН, зам. директора, доктор био- логических наук	Ю.Ю. Дгебуадзе
Алтайский ГУ, Биологический фа- культет; МГУ имени М.В. Ломоносова	декан, профессор заместитель проректора	Г.Г. Соколова Караваяева Е.В.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО с учетом рекоменда-  
ций ПООП ВПО по направлению и профилю подготовки 020400 «Биология», одобрена на  
заседании Учебно-методического совета по биологии 29 ноября 2010г., Протокол №1.

## **Перечень аннотированных магистерских программ (проблемное поле направления подготовки).**

**1. Общая биология.** Актуальные проблемы общей биологии и экологии. Элементы системного анализа и теории управления. Биологические системы различных уровней сложности, механизмы их авторегуляции. Математическое моделирование биосистем. Элементы антропологии. Эволюция и современное состояние биосферы. Природа и общество. Методы и перспективы развития современной биологии. Задачи общего и профессионального биологического и экологического образования. История и методология биологии, экологии и химии; основы дидактики. Философские аспекты современного естествознания. Психолого-педагогическая подготовка: психология и педагогика средней и высшей школы; социальная психология, эргономика, возрастная педагогическая психология. Основы психической саморегуляции. Проектирование содержания учебного процесса и ситуаций инновационного обучения в школе и в вузе. Способы представления и контроля знаний. Решение продуктивных и творческих задач. Практика преподавания биологии, кружковой, лабораторной работы, организации лекционного курса.

**2. Антропология.** Морфология человека. Происхождение и эволюция человека. Онтогенез человека. Физическое развитие и конституции; психофизиологическая типология, полиморфизм человеческой популяции. Учение об антропогенезе, расоведение. Элементы этнографии, археологии, этническая антропология России. Биология человека: экология, генетика, элементы валеологии. Методы антропометрии, вариационной статистики, элементы генетического, иммунологического анализа, другие методы современной антропологии.

**3. Зоология позвоночных.** Теоретические проблемы зоологии позвоночных. Сравнительная анатомия и морфология различных групп позвоночных. Происхождение и систематика хордовых, их многообразие, географическое распространение, экология. Размножение и онтогенез. Анатомия и физиология хордовых как база систематических экологических и зоогеографических исследований. Образ жизни и поведение позвоночных, механизмы приспособлений к средам обитания. Общие вопросы систематики. Частная систематика и филогенез отдельных групп хордовых. Эволюция функциональных систем. Редкие и исчезающие виды; научные основы охраны животного мира и отдельных видов хордовых. Хозяйственное использование позвоночных. Методы зоологических исследований, навыки полевой работы, организации экспедиций, камеральной обработки материала.

**4. Зоология беспозвоночных.** Теоретические концепции и актуальные проблемы зоологии беспозвоночных. Общие вопросы систематики и филогенеза, происхождение и систематика отдельных групп беспозвоночных, их многообразие, географическое распространение, экология. Размножение и онтогенез; жизненные циклы. Анатомия и физиология беспозвоночных как база систематических, экологических и зоогеографических исследований. Поведение и образ жизни, приспособления к среде различных групп; редкие и исчезающие виды беспозвоночных. Научные основы разведения и охраны, хозяйственное использование и медицинское значение беспозвоночных; паразитарные виды и биологические методы борьбы с ними. Методы ожидаемой и экспериментальной зоологии, навыки полевой работы, организации экспедиций, камеральной обработки материала.

**5. Ботаника.** Теоретические проблемы морфологии растений. Размножение растений. Жизненные циклы. Сравнительная анатомия и морфология разных групп растений. Эволюция различных типов морфоструктур в разных таксонах растений. Экология растений. Эволюция жизненных форм в разных группах растений и разных флорах. Анатомия и морфология растений как база систематических, экологических и фитогеографических исследований. Общие вопросы теории систематики. Частная систематика и филогенез различных групп растений. Эколого-фитоценотические и географические факторы эволюции. Филогенез. Теоретические проблемы географии растений. Флористика. Методы анализа флор. Флорогенез. Методы флорогенетических исследований. Проблемы познаваемости истории растительного мира. Основные этапы эволюции растительного покрова Земли в позднем кайнозое. Геоботаника (фитоценология; лесоведение, луговедение, водная и болотная растительность, аридные фитоценозы, изучение агроценозов и др.). Научные основы охраны отдельных видов и флористических комплексов.

**6. Микология.** Теоретические концепции и актуальные проблемы микологии. Морфология и физиология грибов; систематика и филогенетические связи отдельных таксономических групп. Размножение и жизненные циклы. Экология грибов, механизмы их взаимодействия с различными компонентами биогеоценозов. Теоретические представления о происхождении грибов. Практическое применение различных групп в фармакологии и биотехнологии. Почвенная микология; фитопатология. Медицинская микология. Биология наиболее вредоносных патогенов. Методы экспериментальных исследований в микологии.

**7. Физиология человека и животных.** Фундаментальные проблемы физиологии человека и животных. Общая, эволюционная, медицинская и экологическая физиология, основные теоретические концепции и актуальные направления. Эволюция основных функциональных систем организма. Онтогенез функциональных систем. Физиологические регуляции; координация и адаптация физиологических функций к различным условиям внешней среды, их системные и молекулярные механизмы. Элементы патофизиологии и функциональной диагностики. Элементы теории систем; математические и компьютерные методы в современной физиологии. Методы экспериментальной физиологии, функциональной диагностики, хирургии, электрофизиологии, навыки работы с различными лабораторными животными.

**8. Физиология растений.** Основные теоретические концепции и актуальные проблемы физиологии растений. Экологическая физиология растений. Механизмы фотосинтеза, транспорта веществ, дыхания, энергетического и пластического обмена, размножения и развития растений. Клеточная и генетическая инженерия растений. Физиология различных групп растений. Эволюция функциональных систем. Гормоны растений. Иммуни-тет растений. Биологические методы защиты растений от патогенных влияний. Классические и новые методы физиологии растений; культивирование клеток и тканей, клеточная биотехнология.

**9. Генетика.** Общая генетика, генетический анализ, цитогенетика, молекулярная генетика, биотехнология, геновая инженерия, генетика микроорганизмов, генетика растений, генетика животных, генетика человека, популяционная генетика, экологическая генетика, мутационный процесс, молекулярные основы эволюции, генетика развития, генетика органелл, симбиогенетика, мобильные элементы генома, генетический контроль клеточ-

ного цикла, генетический контроль: репликации, рекомбинации, транскрипции, трансляции, сплайсинг. Генная и клеточная инженерия высших растений. Структура и функции хромосом. Генетика поведения. Иммуногенетика. История генетики. Методы количественного анализа, вариационная статистика в генетике.

**10. Биофизика.** Основные концепции и актуальные проблемы теоретической биофизики, биофизики клетки, биофизики мембран, молекулярной биофизики, радиационной биофизики, экологической биофизики. Общая биофизика живых систем. Математические модели, компьютерные методы в биофизике. Физико-химические и физиологические процессы в биологических системах и влияние на них физических факторов. Механизмы авторегуляции биологических функций, их физические аспекты. Методы современной биофизики.

**11. Биохимия и молекулярная биология.** Теоретические аспекты и актуальные проблемы биохимии и молекулярной биологии. Структурно-функциональная организация клетки и субклеточных систем; механизмы биосинтеза белков и нуклеиновых кислот; молекулярная биология клетки; биотехнология и генетическая инженерия; молекулярные механизмы регуляции и адаптации функций клетки и организма. Сравнительная и эволюционная биохимия. Медицинская и динамическая биохимия, экологическая биохимия, иммунология, вирусология. Методы функциональной и клинической биохимии, молекулярной биологии, биотехнологии.

**12. Микробиология и вирусология.** Теоретические основы и актуальные проблемы сравнительно-эволюционной, экологической, медицинской, промышленной микробиологии. Морфология, биохимия, генетика микроорганизмов, их систематика и эволюция, роль ее. Вирусы, бактерии, археи, эукариотные микроорганизмы. Патогенные микроорганизмы и борьба с ними. Хозяйственное использование микроорганизмов. Промышленная микробиология. Микробиологическое повреждение технологических конструкций. Перспективы биотехнологии и генетической инженерии. Методы культивирования и идентификации микроорганизмов, приемы клеточной и генетической инженерии, методы исследования роли микроорганизмов в биогеоценозах.

**13. Экология.** Теоретические концепции и актуальные направления аутоэкологии, синэкологии, популяционной экологии, эволюционной экологии. Учение о биосфере. Общая теория систем. Принципы математического моделирования и компьютерного анализа ем. Частная экология (экология бактерий, грибов, растений, животных). Экологическая физиология. Эволюция биосферы. Антропогенные воздействия на биосферу, техногенные экосистемы. Методы оценки техногенных воздействий на экосистемы и определение экологического риска. Биоиндикация и биотестирование загрязнений природной среды. Экологический мониторинг и экспертиза. Элементы экологического права. Экономика рационального природопользования. Научные принципы и стратегия охраны природы. Российское природоохранное законодательство. Международный опыт и сотрудничество в области охраны природы.

**14. Биология клетки.** Теоретические закономерности и актуальные направления исследований структурно-функциональной организации прокариотных и эукариотных клеток, синцитиев, плазмодиев, симпластов. Общая цитология, общая и сравнительная гистология, молекулярная биология клетки, структурно-функциональная организация и регуляция экспрессии генома, механизмы авторегуляции и адаптации клеток, пролифера-

ции и дифференцировки, интеграции клеток в различных организмах, межклеточные взаимодействия. Проблемы опухолевого роста. Методы световой и электронной микроскопии, культивирования клеток, выделения и исследования субклеточных структур, анализа метаболических процессов, иммунохимии, другие методы клеточной биологии.

**15. Биология развития.** Теоретические основы и современные направления биологии развития. Сравнительно-морфологические, физиологические молекулярные аспекты индивидуального развития организмов различных таксономических групп. Молекулярная развития. Механизмы дифференцировки, морфогенеза, роста. Межклеточные взаимодействия и регуляторные процессы, обеспечивающие целостность развивающегося организма. Экологическая и эволюционная биология развития. Медицинская и сельскохозяйственная биология развития. Цитологические, гистологические, морфологические, молекулярно-биологические, генетические методы в биологии развития. Эмбриоинженерия.

**16. Нейробиология.** Теоретические концепции и актуальные проблемы физиологии нервной системы и нейрона, нейрохимии, молекулярной нейробиологии, нейроморфологии и нейрофармакологии. Нейробиология поведения. Нейропсихология. Сложные формы по и психические процессы: когнитивные функции, память, обучение, речь, сознание. Экспериментальные модели и методы современной нейробиологии. Математическое моделирование в нейробиологии.

**17. Психофизиология.** Теоретические концепции и актуальные проблемы; физиологические механизмы психической деятельности, физиологических основ сенсорного восприятия и формирования ощущений. Физиологические аспекты общей психологии, высшей деятельности, психопатологии; психофизиология стресса, возрастная психофизиология. Психофизиологическая диагностика заболеваний сенсорных систем, дефектов речи и интеллекта. Проблемы индивидуальных различий, формирование доминантных состояний, определяющих психику человека. Проблема искусственного интеллекта. Методы электрофизиологических, морфологических исследований, тестирования нервно-психического статуса человека. Методы математического моделирования в психофизиологии.

**18. Иммунология.** Теоретические концепции и актуальные направления науки о защитных системах организмов. Иммунитет растений, животных и человека. Строение, свойства и взаимодействие антигенов и антител. Иммунохимия. Иммуногенетика. Цитологические механизмы иммунного ответа. Сравнительная иммунология. Клиническая иммунология. Основные методы иммунологии и их использование для решения фундаментальных проблем биологии, выделения и идентификации индивидуальных белков.

**19. Гистология.** Теоретические и методологические аспекты сравнительно-эволюционной и медицинской гистологии. Эволюция тканей. Гистогенез в индивидуальном развитии. Строение и функции специализированных клеток, промежуточных сред, взаимодействие клеток в ткани и в организме, регенерация; регуляторные механизмы целостности и интеграции тканей в функциональных системах организма. Элементы патофизиологии и патология клеток. Гистологическая диагностика. Методы световой и электронной микроскопии, автордиографии, иммуно- и гистохимии, культуры клеток и тканей и другие методы исследования.

**20. Медико-биологические науки.** Теоретические концепции и актуальные проблемы в области фундаментальной медицины и биомедицинских исследований (медицин-

ской биохимии, медицинской биофизики и др.). Нормальная и патологическая физиология человека, гистология, биохимическая и биофизическая диагностика заболеваний, элементы современной фармакологии, биологические основы здоровья и патологии, проблемы экологии человека, представления о различных системах сохранения здоровья, излечения болезней и продления жизни человека. Методы физиологии и экспериментальной медицины.

**21. Альгология.** Теоретические аспекты и современные направления систематики, флористики, географии и экологии водорослей. Морфология, биология размножения. Фитопланктон и фитобентос морских и континентальных водоемов. Водоросли почв. Водоросли как показатели состояния экосистемы. Основы цитологии, физиологии, биохимии и генетики водорослей. Палеоальгология. Основные этапы становления растительного мира. Методы микропалеоальгологии, систематики, цитологии водорослей.

**22. Энтомология.** Фундаментальные проблемы эволюционной и функциональной морфологии насекомых. Систематика, происхождение и филогенез насекомых и других наземных членистоногих. Физиология наземных членистоногих: эволюция функций, нервно-мышечная физиология, эндокринология, физиология развития, особенности иммунной системы. Экология и поведение насекомых. Жизненные циклы и закономерности их регуляции. Половое поведение. Фундаментальные основы прикладной энтомологии в сельском хозяйстве, пищевой промышленности, медицине, ветеринарии и биотехнологии. Методы описательной и экспериментальной энтомологии.

**23. Гидробиология и ихтиология.** Фундаментальные проблемы надорганизменного уровня организации водной биоты, изучение структурных свойств и закономерностей функционирования водных экосистем, управление ими. Глобальные и региональные океанологические и лимнологические явления. Системный подход как методологическая база гидробиологии; методы учета гидробионтов, анализ количественных данных и изучение факторов среды. Теоретические основы, методы и современные достижения ауто- и синэкологии гидробионтов, санитарно-технической гидробиологии, продукционной гидробиологии аквакультуры, биоиндикации качества вод и рационального использования водных ресурсов. Теоретические и методологические аспекты изучения рыб и круглоротых, экологии, этологии, динамики популяции, состава рыб открытого океана, морей и пресных вод. Эволюция и систематика, географическое распространение рыб. Прикладные проблемы - разработка биологических основ рыбного промысла, ведение рационального рыбного хозяйства, охрана и воспроизводство рыбных ресурсов.

**24. Биоинженерия.** Основы физико-химической биологии. Экспериментальные и теоретические методы установления химической и пространственной структуры биополимеров. Основы молекулярной, белковой, клеточной и метаболической инженерии. Молекулярные методы диагностики. Оптическая микроскопия и микроспектроскопия. Атомно-силовая и зондовая микроскопия. Методы нанотехнологий в биоинженерии. Компьютерное молекулярное моделирование и молекулярный дизайн белков, пептидов, биомембран и иных био- и наноструктур. Математические модели в химии и биологии.

**25. Биоинженерия и менеджмент научных исследований и высоких технологий.** Основы физико-химической биологии. Экспериментальные и теоретические методы установления химической и пространственной структуры биополимеров. Основы молекулярной, белковой, клеточной и метаболической инженерии. Молекулярные методы диаг-

ностики. Оптическая микроскопия и микроспектроскопия. Атомно-силовая микроскопия. Методы нанотехнологий в биоинженерии. Компьютерное молекулярное моделирование и молекулярный дизайн био- и наноструктур. Математические модели в химии и биологии. Охрана интеллектуальной собственности. Основы финансовой и хозяйственной деятельности научных и инновационных предприятий. Управление инновационными и научными проектами. Основы деловой этики.

**26. Биотехнология.** Теоретические основы биотехнологии. Основы генной и клеточной инженерии. Молекулярные основы биотехнологии. Надклеточная инженерия: Эмбриоинженерия, Аквакультура, Промышленная энтомология. Инженерная энзимология. Генетическая инженерия. Клеточная инженерия и иммунология. Промышленная микробиология. Медицинская микробиология. Прикладная биоэнергетика. Прикладная вирусология. Биотехнологические методы в охране окружающей среды. Биотехнология вторичных продуктов и отходов. Методы иммунологии и гибридные технологии. Биотехнология биологически активных соединений, лекарственных препаратов. Биотехнология продуктов питания. Создания биосистем с новыми свойствами. Техническое обеспечение биотехнологического производства.

**ПРИМЕРНАЯ ПРОГРАММА**

**Наименование дисциплины**

**«МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНО-БИО  
СТРУКТУР»**

**Рекомендуется для направления подготовки**

020400 Биология

Квалификация (степень) выпускника магистр

**Цели и задачи дисциплины:** 1) ознакомление с современными достижениями в области компьютерного моделирования динамики биомолекулярных объектов и систем; 2) освоение теоретических основ компьютерного моделирования и информатики как средств исследования структурно-динамических свойств водорастворимых и мембранных белков; 3) обучение профессиональному владению современными методами молекулярного моделирования нано-био структур.

**Место дисциплины в структуре ООП:** Цикл М.2, вариативная часть (магистерская программа «Биоинженерия и нанобиотехнология»). Читается на 1 году магистратуры или аспирантуры в 1 – 2 семестрах обучения.

**В начале курса** студент должен иметь достаточные знания в области клеточной биологии, биохимии, биофизики, молекулярной биологии в объеме программы бакалавриата биологии, прослушав соответствующие курсы и имея по ним положительные оценки. Желательно, чтобы студент, приступая к изучению данного курса, мог продемонстрировать следующие общие компетенции бакалавра биологии: ОК-6, ОК-10, ОК-12, ОК-13, ОК-14, ОК-15, ОК-16, ОК-18, ПК-3, ПК-4, ПК-5, ПК-6, ПК-11, ПК-15, ПК-16, ПК-17, ПК-19 (см. раздел 1.3.1).

**Требования к результатам освоения дисциплины:**

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

1. Знать: представления, лежащие в основе моделирования молекулярной динамики; возможности компьютерной реализации; функциональный вид и природу потенциалов молекулярного взаимодействия; вид уравнений движения, учитывающих влияние внешней среды и наличие различных граничных условий; базовые алгоритмы для нахождения межмолекулярных взаимодействий и численного интегрирования уравнений движения молекулярной системы; примеры постановок и использованных технологий при проведении вычислительных экспериментов с нано-био структурами; примеры вычислительных экспериментов с белками и биомембранами и полученные в них результаты; место и роль молекулярного моделирования нано-био структур в биофизике и биотехнологии.

2. Уметь: сформулировать модельное представление молекулярного нано-объекта и возможности организации вычислительных молекулярно-динамических экспериментов с ним; проводить расчеты для модельных молекулярных систем с использованием различных программных средств; проводить обработку результатов молекулярно-динамических расчетов.

3. Владеть: методами и основными программными средствами для молекулярного моделирования нано-био структур.

4. Студент должен демонстрировать навыки использования вычислительных методов и уметь использовать эти методы в планировании и осуществлении вычислительных экспериментов.

По завершении курса студент также должен демонстрировать следующие общие компетенции магистра биологии: ОК-1, ОК-2, ОК-6, ПК-2, ПК-3, ПК-6, ПК-8, ПК-9, ПК-10, ПК-11, ПК-12, ПК-13 (см. раздел 1.3.1). На материале курса студент должен проявлять способность к творчеству, системному мышлению, самостоятельно приобретать и использовать новые знания и умения, самостоятельно анализировать имеющуюся информацию, профессионально оформлять и представлять результаты научно-исследовательских работ.

### Объем дисциплины и виды учебной работы:

Объем учебного времени, необходимого для освоения курса – 4 зачетных единицы, что составляет 144 учебных часа, в том числе самостоятельная работа в объеме не менее 72 часов.

**Виды занятий:** лекционные, семинарские, практические, самостоятельные: реферирование, подготовка отчетов, контрольных работ, подготовка к экзаменам.

### Рекомендуемая структура обучения по дисциплине

№ п/п	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Семинары	Сам. работа с препод.	Индивид. са-мост. раб.	
1.	Основы моделирования молекулярной динамики	9	1-5	10	10	1	5	Устный опрос Контр. работа
2.	Алгоритмы учета термодинамических характеристик среды	9	6-9	8	8	1	5	Устный опрос Контр. работа
3.	Технологии постановки и проведения вычислительных экспериментов с различными биомолекулярными системами	9	10-15	12	12	1	5	Устный опрос
4.	Программное обеспечение молекулярного моделирования нано-био структур	10	1-14		6	22	6	Устный опрос
5.	Учебная НИР “Моделирование молекулярной динамики гидратированной макромолекулярной системы”	10	6-16		2	4	22	Устный опрос
7	Промежуточная аттестация	9	16			2		Экзамен
8	Промежуточная аттестация	10	16			2		Зачет
	Всего часов			30	38	33	43	

### Содержание дисциплины:

#### Основы моделирования молекулярной динамики

*Введение. Моделирование молекулярной динамики.* Предмет курса. Краткая история численного моделирования молекулярной динамики. Вычислительный эксперимент, его роль и место в нанобиотехнологии.

*Пространственные и временные масштабы.* Единицы измерения в «молекулярном мире». Характерные единицы массы, энергии, времени. О числе частиц в моделируемой молекулярной системе. Эффективный учет растворителя. Периодические граничные условия.

*Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярного взаимодействия.* Молекулярная система представляется в виде совокупности взаимодействующих материальных частиц. Энергия молекулярной системы складывается из энергий валентных связей, валентных углов, торсионных углов, плоских групп, ван-дер-ваальсовых и кулоновских взаимодействий. Функциональный вид этих взаимодействий, то есть формулы, по которым вычисляется энергия взаимодействующих атомов, если известны их координаты, и таблицы параметров (значений коэффициентов, зависящих от типов атомов) задают силовое поле. Невалентные взаимодействия: ван-дер-ваальсовы и кулоновские силы. Радиус обрезания. Комбинационные правила. Экранирование кулоновского потенциала.

*Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий.* Оценка числа невалентных взаимодействий. Эффективные алгоритмы, использующие конечный радиус взаимодействия. Алгоритм Верле (= метод составления списков). Оценка его быстродействия. Гибкий алгоритм оценки для пересчета списков. Метод сканирования по пространству (присоединенные списки). Линейная зависимость трудоемкости вычислений от числа частиц.

*Численное интегрирование уравнений движения.* Алгоритм Верле (простейшая разностная аппроксимация). Алгоритм с перескоками (leap-frog алгоритм). Скоростной алгоритм Верле.

### **Алгоритмы учета термодинамических характеристик среды**

*Учет влияния внешней среды. Термостаты.* Температура. Мгновенная температура. Уравнения движения молекулярной системы, учитывающие наличие термостата. Изотермическая молекулярная динамика (метод масштабирования). Термостат Берендсена. Термостат Нозе-Гувера. Стохастическое воздействие оружающей среды. Броуновская динамика. Столкновительная молекулярная динамика.

*Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена.* Определение давления в малой молекулярной системе. Давление на стенку. Частицы между двумя стенками. Вириал сил. Частицы в ящике. Формулы для давления. Напряжение в сечении, параллельном стенке. Периодические граничные условия. Вывод формул для давления. Баростат Берендсена.

### **Технологии постановки и проведения вычислительных экспериментов с различными биомолекулярными системами**

*Моделирование биологических мембран.* Описание технологи приготовления биологической мембраны, включающее приготовление фосфолипидного бислоя, его релаксацию, выращивания цилиндрической полости, пронизывающей бислоем, заключение каналообразующего пептида в такой же цилиндр, совмещение двух подсистем, релаксацию образованной биомембраны и, наконец, получение продуктивной траектории.

*Силовое разворачивание белковых глобул.* Приведено описание постановки вычислительных экспериментов и исследования процесса разрушения двух иммуноглобулин связывающих доменов белков L и G под действием внешних сил. Показано, что хотя эти два белка имеют близкую пространственную структуру, механизмы их разрушения различны.

*Постановка молекулярно-динамических расчетов с дендримерами.* Дендримеры – новый класс регулярных полимеров, которые характеризуются исходящей из одного центра древовидной структурой, большим количеством центров ветвления и отсутствием замкнутых циклов. Решаются вопросы: как сконструировать дендример заданного химического состава и заданной молекулярной массы; его релаксация; помещение в растворитель; приготовление представительной конфигурации; и наконец, проведение продуктивного расчета. Пример расчета для гидратированного полиамидаминного (ПАМАМ) дендримера.

### **Освоение программного обеспечения для молекулярного моделирования нано-био структур**

Интернет-ресурс “Protein Data Bank”. Ознакомление и работа с программами RasMol, VMD, HyperChem. Программы для моделирования молекулярной динамики биомолекулярных структур Modur и PUMA. Лабораторные работы «Молекулярная динамика пептидов» и «Молекулярная динамика фосфолипидов». Программа для анализа траекторий молекулярной динамики.

### **Проведение НИР “Моделирование молекулярной динамики гидратированной макромолекулярной системы”**

Основываясь на опыте, приобретенном при выполнении лабораторных работ и с использованием доступного программного обеспечения (программы Modur и ПУМА) планируется (каждому студенту индивидуально) осуществить научно-исследовательскую работу, включающую: (а) выбор из имеющегося списка или определить самостоятельно моделируемый объект исследования (pdb-файл небольшой макромолекулы); (б) создать расчетную ячейку с гидратированной ячейкой; (в) создать структурный файл (модуль Predmd); (г) провести вычислительный эксперимент с записью траектории молекулярной динамики при заданных термодинамических параметрах (температуре и давлении); (д) имея траекторию найти представляющие интерес характеристики макромолекулы с помощью доступного или самостоятельно написанного программного обеспечения; (е) повторить расчет с другими параметрами системы или внешней среды, или начальными данными для изучения влияния этих параметров на поведение молекулярной системы и/или для набора статистики. Подготовить отчет по результатам проведенного исследования.

**Ресурсное обеспечение:** материально-техническую базу практических занятий, дистанционных занятий, информационное обеспечение курса также необходимо достаточно подробно указать в последнем разделе УМК. Данный раздел должен быть представлен разработчиками содержательной части курса.

**Методические рекомендации по организации изучения дисциплины: Рабочая программа** (подразделяется на 50 модулей). 15 из этих модулей – лекции, которые могут быть представлены в мультимедийном варианте, пригодном для использования в **дистанционном** обучении. Предпочтительной формой обучения является **очная**. Для **дистанционного обучения** предлагается смешанная очно-заочная форма с периодическим проведением аудиторных занятий – консультаций с преподавателем. Семинарские занятия в случае дистанционного обучения могут осуществляться в форме тренинга в электронной форме, используя электронную почту или веб-форумы. Но необходимо также организовать короткие выездные школы для групповых занятий с преподавателем с целью установочных лекций и проведения промежуточного контроля.

### **Рекомендуемые формы, методы и средства организации образовательного процесса**

При освоении дисциплины “Молекулярное моделирование нано-био структур” предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм приобрете-

ния новых знаний. В обязательном порядке должен быть обеспечен доступ студентов в Интернет. Во втором семестре запланирована активная работа в компьютерном классе. Желательно также, чтобы студентам была предоставлена возможность удаленного доступа к ресурсам на вычислительном кластере.

В первом семестре образовательный процесс ориентирован в основном на теоретическую подготовку магистрантов, во втором – на приобретение ими практических навыков.

Первая, вводная лекция, призвана возбудить интерес к осваиваемой дисциплине. Помимо иллюстративного материала в форме слайдов, на ней представлен интерактивный анимационный фильм, демонстрирующий молекулярную динамику взаимодействующих частиц. Такого же рода молекулярно-динамические анимации предусмотрены еще в двух лекциях. Иллюстративный материал в виде мультимедийных слайдов предусматриваются во всех лекциях. Структура лекционного материала направлена на освоение методов молекулярного моделирования и понимание границ их применимости. Семинары призваны активизировать работу магистрантов по освоению теоретического материала, изложенного на лекциях.

Помимо посещения лекций и занятий на семинарах предусматривается самостоятельная работа студентов с возможностью доступа к Интернет-ресурсам и электронным учебным модулям УМК "Молекулярное моделирование нано-био структур". В начале семестра на сайте кафедры открываются форумы по всем разделам дисциплины этого семестра. В первом послании на форуме содержатся указания преподавателя и ссылки на электронные материалы, служащие помочь в освоении темы. Вход на форум для каждого студента персонифицирован. Студенты имеют возможность обсудить на форуме текущую тему, задать вопросы, получить на них суждения и ответы других студентов, подвести итоги и сформулировать консолидированные вопросы к преподавателю. Для этого по каждой теме преподавателем назначаются студенты-тьюторы, задача которых участвовать в дискуссии, влиять на ее ход и к назначенной дате (по итогам одной-двух недель) подводить промежуточный итог дискуссии. Все это явным образом на сайте форума. Преподаватель имеет возможность проанализировать ход дискуссии по текущей теме и ее результаты, оценить роль каждого студента, принявшей в ней участие, и работу студентов-тьюторов. В ходе дискуссии преподаватель также имеет возможность давать советы по использованию тех или иных ЭУМ, давать ссылки на другие полезные информационные ресурсы. Вопросы, поднятые во время дискуссии, выносятся на итоговый семинар. На нем преподаватель дает ответы на заданные и еще не получившие ответов вопросы, уточняет недостаточно полные и исправляет неправильные ответы и суждения студентов.

Второй семестр ориентирован на:

1) практическое освоение программных средств, используемых при молекулярном моделировании нано-био структур;

2) проведение индивидуальных научно-исследовательских работ по постановке вычислительных экспериментов и анализу полученных траекторных файлов для конкретных молекулярных систем.

Оба раздела дисциплины предполагают активную работу за компьютером. Освоению каждой из программ для молекулярного моделирования предшествует вводный семинар, на котором преподаватель дает общее представление о программном комплексе, его назначении и возможностях. Знакомство с описанием и руководством по работе с комплексом программ осуществляется студентом самостоятельно с использованием доступа по Интернет к соответствующим ЭУМ дисциплины. После этого студент готов к практическому освоению работы за компьютером с данной программной системой. Про-

исходит это в компьютерном классе в присутствии преподавателя-консультанта. Для проверки степени освоения программы предлагается набор учебных тестов.

Активному формированию основных компетенций обучающегося по данной дисциплине должно способствовать проведение им учебной научно-исследовательской работы. Для исследования каждый из студентов получает свой молекулярный объект. Это различные молекулы фосфолипидов, пептидов, небольших белков. Для этих объектов заготовлены их описания и данные по структуре в формате PDB-файлов. Студент имеет возможность и самостоятельно предложить для исследования свой молекулярный объект. Это может быть, например, молекулярная система, с которой будет связана тема его магистерской диссертации. Проведение НИР требует активной самостоятельной многочасовой работы за компьютером. Возможность такой работы должна быть ему обеспечена в компьютерном классе (необходимо использовать установленные в нем пакеты программ молекулярного моделирования). Кроме того, наиболее трудоемкие вычисления, связанные с получением траектории молекулярной динамики моделируемого молекулярного объекта, должны выполняться на многопроцессорном вычислительном кластере. Контроль за ходом расчета траектории может осуществляться студентом с использованием удаленного доступа через Интернет. В период выполнения учебной НИР на сайте кафедры открыт персонализированный форум студентов, позволяющий им оперативно делиться опытом, ставить одни и отвечать на другие вопросы, сообщать о возникающих трудностях, получать советы преподавателей. Периодически, раз в две-три недели, проводятся консультации преподавателя, способствующие более эффективной и плодотворной исследовательской работе студентов.

Самостоятельная работа студентов подкреплена учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, руководства и инструкции по работе с программным обеспечением.

Удельный вес интерактивных форм обучения составляет 70% аудиторных занятий, лекции составляют 30% аудиторных занятий.

#### **Рекомендуемые оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

Для текущего контроля усвоения теоретического материала, изложенного на лекциях, подготовлен список вопросов, упражнений и задач, включающий все темы. Этот перечень служит основой для самоконтроля и проверки знаний. Ключевые и трудно усваиваемые моменты обсуждаются на семинарах, там же проводится устный опрос студентов. В теоретической части курса для осуществления текущего контроля предусмотрено выполнение домашних заданий (контрольных работ) по основным направлениям дисциплины. Для текущего контроля успеваемости используются также материалы форумов по всем разделам дисциплины, которые работают на сайте кафедры с начала учебного семестра. Организация работы форумов такова (см. предыдущий раздел), что она должна побуждать студентов к активному участию в них и способствовать усвоению полученных знаний. Поскольку вход на форумы персонализирован и каждый выход него (вопрос, ответ, замечание, высказывание) сопровождается именем участника, то преподаватель может оценить как общий уровень подготовки студентов, так и начислить определенные баллы каждому из них. На итоговых семинарах по темам преподаватель имеет возможность уточнить эти оценки и довести их до сведения слушателей.

Изучение теоретической части курса в первом семестре завершается промежуточной аттестацией в форме экзамена.

Во втором семестре значительное время проводится в компьютерном классе, где происходит практическое освоение работы с различными пакетами программ для молеку-

лярного моделирования и постановка и проведение вычислительных экспериментов, связанных с выполнением учебной НИР. Работа в компьютерном классе проводится в присутствии преподавателя-консультанта. Для текущего контроля степени освоения каждой из программ предлагаются наборы учебных тестов, включающих ответы на вопросы и результаты работы с программой. Программное средство считается освоенным только в том случае, если выполнен весь набор предусмотренных учебных тестов. Результаты освоения программных средств заносятся в личные электронные карточки студентов.

По результатам проведенных вычислительных экспериментов по теме НИР студент пишет письменный отчет.

Промежуточная аттестация по второй части курса проводится в конце второго семестра в виде зачета, на котором учитываются результаты освоения студентом пакетов программ для молекулярного моделирования и рассматривается его отчет с результатами проведенного молекулярно-динамического исследования.

### **Примерный перечень вопросов проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины**

#### ***Экзаменационные вопросы (промежуточная аттестация):***

1. Моделирование молекулярной динамики, идейные основы и возможности компьютерной реализации.
2. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярных взаимодействий.
3. Уравнения движения молекулярной системы. Их разностная аппроксимация (алгоритмы: Верле, leap-frog Верле, скоростной Верле).
4. Моделирование динамики конденсированных систем. Периодические граничные условия.
5. Алгоритм Верле (составление списка соседей) для вычисления невалентных взаимодействий. Оценка быстродействия.
6. Алгоритм сканирования для нахождения ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Оценка быстродействия.
7. Температура. Термостатирование молекулярной системы (масштабирование скоростей; термостат Берендсена; термостат Нозе-Гувера; стохастическая динамика; столкновительный термостат).
8. Учет растворителя. Броуновская динамика. Столкновительная молекулярная динамика.
9. Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена.
10. Моделирование макромолекулы в гидродинамическом потоке.
11. Общая схема молекулярно-динамического вычислительного эксперимента.
12. Молекулярная динамика белков. Примеры постановка вычислительных экспериментов.
13. Обработка траекторий молекулярной динамики. Временные автокорреляционные функции. Коэффициенты переноса.
14. Методика проведения молекулярно-динамических расчетов с биомембранами.
15. Моделирование силового разворачивания белковой глобулы.
16. Постановка молекулярно-динамических расчетов с дендримерами

#### ***Вопросы и упражнения текущего контроля теоретической подготовки:***

*К лекции 1 (Введение. Моделирование молекулярной динамики):*

1. Какие представления лежат в основе моделирования тепловой подвижности атомарных систем методом молекулярной динамики? Когда и для каких молекулярных систем были проведены первые вычислительные эксперименты с применением метода молекулярной динамики?
2. Дайте схематическое описание постановки и проведения молекулярно-динамического вычислительного эксперимента.
3. Какие программные комплексы для моделирования молекулярной динамики биомолекулярных систем наиболее распространены в настоящее время?

*К лекции 2 (Пространственные и временные масштабы):*

4. 1 кг воды при нормальных условиях занимает объем 1 литр. Найдите объем, приходящийся в среднем на одну молекулу воды. Оцените расстояние между кислородами соседних молекул воды, предположив, к примеру, что молекулы воды расположены в узлах простой кубической решетки.
5. Приведите характерные величины пространственных, временных и энергетических масштабов, возникающих при описании молекулярных систем. Какие методы их оценки можете Вы предложить?
6. 1000 атомов заполняют куб и располагаются в узлах простой кубической решетки. Найдите число атомов (а) лежащих на поверхности куба и (б) лежащих в приповерхностном слое. Какую долю от всех атомов составляют атомы этих двух слоев?
7. Дать определение расчетной ячейки с периодическими граничными условиями. Аргументируйте полезность введения периодических граничных условий при моделировании конденсированного состояния вещества.
8. Пусть конденсированная молекулярная система имеет трансляционную симметрию по трем координатным направлениям с периодами  $a_x$ ,  $a_y$ ,  $a_z$  соответственно. Определим расчетную ячейку как прямоугольный параллелепипед, совпадающий с ячейкой периодичности и расположенный в начале координат. Для произвольной частицы, имеющей координаты  $(x, y, z)$ , выписать формулы (указать алгоритм) для нахождения координат ее образа в расчетной ячейке.
9. Полимерная молекула в разбавленном растворе имеет состояние клубка. Для моделирования ее поведения была предложена модель, в которой полимер был представлен цепочкой из 100 шаров диаметра 1, соединенных валентными связями длины 1, а растворитель – простыми шарами диаметра 1. Расчетная ячейка была взята в форме куба с периодическими граничными условиями. Оцените общее число шаров, которое необходимо поместить в расчетную ячейку для того, чтобы в процессе тепловых флуктуаций полимерного клубка сохранялись условия разбавленного раствора, то есть, чтобы полимер не имел контактов с образами полимера в соседних ячейках.

*К лекции 3 (Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярного взаимодействия):*

10. Взаимодействие атомов нейтральных газов хорошо описывает потенциал Леннарда-Джонса. Приведите его вид. Укажите параметры потенциала и их физический смысл. Выведите формулы для сил межмолекулярного взаимодействия, задаваемых потенциалами Леннарда-Джонса.
11. Привести примеры потенциальных функций описывающих взаимодействие атомов с непроницаемой гладкой стенкой. Рассмотреть случаи: а) сорбирующей стенки; б) чисто-го отталкивания.

Указание: Рассмотреть потенциал вида 
$$u(x) = \frac{\epsilon}{2} \left[ \left( \frac{\sigma}{x} \right)^9 - 3 \left( \frac{\sigma}{x} \right)^3 \right]$$

12. Описать постановку вычислительного эксперимента по моделированию поведения жидкого аргона в щелевидной поре.

Указания:

- 1) взаимодействие атомов аргона задать парным потенциалом Леннард-Джонса;
  - 2) щелевидную пору задать двумя параллельными гладкими непроницаемыми стенками;
  - 3) в латеральных направлениях щелевидной поры ввести периодические граничные условия.
13. Записать выражение для силы, действующей на  $i$ -й атом, если известно выражение  $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  для полной энергии молекулярной системы как функции координат составляющих ее атомов.
14. Из каких компонент складывается энергия молекулярной системы? Перечислите основные составляющие потенциальной энергии.
15. Считая, что используется функциональный вид основных вкладов в потенциальную энергию, принятый в силовом поле Amber, приведите формулы для потенциальной энергии (а) валентных связей, (б) валентных углов, (в) торсионных углов, (г) плоских групп, (д) ван-дер-ваальсовых взаимодействий в форме потенциала Леннард-Джонса, (е) экранированных кулоновских взаимодействий.
16. Потенциал валентной связи между атомами  $i$  и  $j$  задан в форме  $u_b = K(r - b_0)$ , где  $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  – расстояние между атомами, а  $b_0$  – ее равновесная длина. Вывести формулы для вкладов в силы, действующие на атомы, со стороны этой валентной связи.
17. Потенциал валентного угла задан в форме  $u_g = K_g(\vartheta - \vartheta_0)$ , где  $\vartheta$  – валентный угол, образованный тремя атомами  $i, j$  и  $k$ , а  $\vartheta_0$  – его равновесное значение. Вывести формулы для вкладов в силы, действующие на атомы, со стороны этого валентного угла.
18. Потенциал торсионного угла задан в форме  $u_\tau = K_\tau [1 + \cos(3\varphi)]$ , где  $\varphi$  – значение торсионного угла, образованного атомами  $i, j, k$  и  $l$ . Вывести формулы для вкладов в силы, действующие на атомы, со стороны этого торсионного угла.
19. Невалентное взаимодействие между частицами  $i$  и  $j$  задано в форме потенциала Леннард-Джонса  $u_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$ , где  $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  – расстояние между атомами. Вывести формулы для вкладов в силы, действующие на атомы, со стороны этого взаимодействия.
20. Какой вид приобретут формулы для сил, полученные в предыдущем упражнении, если используется модифицированный потенциал Леннард-Джонса, имеющий конечный радиус взаимодействия:  $\tilde{u}_{LJ}(r) = u_{LJ}(r) \cdot W(r)$ , где

$W(r) = \begin{cases} \frac{(R_{off} - r^+)(R_{off} - 3R_{on} + 2r^+)}{(R_{off}^2 - R_{on}^2)^3}, & \\ 0, & \end{cases}$	$r \leq R_{on}$
	$R_{on} < r < R_{off}$
	$r \geq R_{off}$

Здесь  $R_{off}$  – радиус невалентного взаимодействия, а  $R_{on}$  – начало действия функции гладкого выключения взаимодействия.

21. Электростатическое взаимодействие между частицами  $i$  и  $j$  задано в форме экранированного кулоновского потенциала  $u_q(r_{ij}) = \frac{q_i q_j}{\epsilon r_{ij}} W_q(r_{ij})$ , где  $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  – расстояние между атомами, а  $W_q(r_{ij})$  – экранирующая функция:

$W_q(r) = \begin{cases} 1 - \frac{r}{R_q} \\ 0 \end{cases},$	$r < R_q$	
	$r \geq R_q$	

Здесь  $R_q$  – радиус экранирования.

*К лекции 4 (Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий):*

22. В чем состоит идея метода Верле (метода составления списков), позволяющая значительно сократить количество вычислений при вычислении невалентных взаимодействий? Привести оценки числа вычислений на одном временном шаге и требуемой памяти при вычислении невалентных взаимодействий. Указать недостатки метода.
23. Описать процедуру гибкого определения момента пересчета списка пар частиц в методе Верле, гарантирующего своевременное включение в него любой пары частиц, сблизившихся на расстояние взаимодействия.
24. Описать процедуру вычисления невалентных взаимодействий по методу сканирования по пространству. Показать, что трудоемкость метода на шаге линейно зависит от числа частиц  $N$  в молекулярной системе при увеличении ее размеров.
25. Продемонстрировать работу алгоритма сканирования по пространству для вычисления невалентных взаимодействий. Для этого рассмотреть модельный пример плоской системы из небольшого числа частиц (скажем, десяти). Расчетную ячейку также разбить на небольшое число элементарных ячеек. Выписать главный и присоединенный массивы для этого случая. Рассказать, используя этот демонстрационный пример, всю процедуру вычисления сил на данном шаге по имеющимся координатам частиц.

*К лекции 5 (Численное интегрирование уравнений движения):*

26. Сформулировать, в чем состоит алгоритм Верле (простейшая разностная аппроксимация) для численного интегрирования классических уравнений Ньютона для системы взаимодействующих материальных частиц. С какой точностью на шаге находятся координаты атомов? Доказать! Как можно находить скорости частиц при использовании этого метода? Указать точность, с которой находятся при этом скорости.
27. Дать описание алгоритма с перескоками (или leap-frog алгоритма) для численного интегрирования классических уравнений движения взаимодействующих атомов. Вывести расчетные формулы. Привести оценки точности, с которой вычисляются координаты и скорости.
28. Привести формулы для скоростного алгоритма Верле для численного интегрирования классических уравнений движения молекулярной системы. Показать, что траектория, получаемая с применением этого метода, в точности совпадает с траекториями, которые дает применение простого алгоритма Верле и алгоритма с перескоками. В чем преимущество скоростного алгоритма Верле?

*К лекциям 6-7 (Учет влияния внешней среды. Термостаты):*

29. Привести формулы для определения мгновенной и средней по траектории температуры молекулярной системы. Аргументировать применение таких определений, приведя вывод соотношения, связывающего среднюю кинетическую энергию отдельной частицы (любой)

с температурой для ансамбля взаимодействующих частиц, подчиняющихся классическому распределению Гиббса.

30. Описать возможные способы приведения моделируемой молекулярной системы к состоянию, отвечающему заданной температуре. Модификация уравнений движения для эффективного учета термостатирующего воздействия внешней среды.
31. Что такое «изотермическая молекулярная динамика»? Выписать уравнения движения, являющиеся аналогом уравнений Ньютона, но для которых интегралом уравнений движения является не полная энергия, а кинетическая энергия системы.
32. Дать описание «термостата Берендсена». Выписать уравнения движения для этого случая. Отметить известные недостатки применения этого метода для термостатирования молекулярной системы.
33. Привести уравнения движения молекулярной системы, использующие термостат Нозе-Гувера. Опишите, в чем состоит его применение.
34. Описать различия двух групп подходов для эффективного описания взаимодействия моделируемой молекулярной системы с внешней термодинамической средой: подходы типа термостатов Берендсена, Нозе-Гувера, метода масштабирования и подходов типа броуновской и столкновительной динамики.
35. Дать описание метода броуновской динамики. Какие силы определяют поведение молекулярной системы при использовании уравнений броуновской динамики? Как задается температура среды? Какой еще внешний параметр регулирует свойства среды? Сформулировать флуктуационно-диссипативную теорему, связывающую флуктуации случайных сил с коэффициентом трения и температурой среды.
36. Дать описание метода столкновительной молекулярной динамики. Каким образом учитывается внешняя среда? Как задается температура? Каким образом происходят столкновения атомов с виртуальными частицами среды? С каким физическим свойством внешней среды (растворителя) связана частота столкновений?
37. Продемонстрировать связь между броуновской динамикой и столкновительной динамикой на примере рассмотрения поведения отдельной частицы. Привести соотношение, связывающее коэффициент трения в броуновской динамике и параметров столкновительной молекулярной динамики.
38. Рассмотреть случай применения столкновительной молекулярной динамики для моделирования поведения макромолекулы в потоке.

*К лекциям 8-9 (Вычисление давления в малых молекулярных системах):*

39. Что такое давление в молекулярной системе, ограниченной стенками? Привести доказательство, что давление на обе стенки молекулярной системы, заключенной в щелевидную пору, одинаково. Привести вывод формул для давления в ограниченном объеме («щелевидная пора», «ящик»), выражающих его через вириал внутримолекулярных сил и кинетическую энергию или температуру.
40. Привести формулы для определения напряжения в сечении, параллельного стенке, и потока импульса через это сечение. Показать существование инварианта, связанного с таким сечением и не зависящего от положения этого сечения. Дать определение давления в сечении.
41. Рассмотреть случай периодических граничных условий. Уточнить формулы для давления в сечении, ортогональном выбранному координатному направлению, для данного случая. Привести вывод расчетных формул для давления в молекулярной системе с периодическими граничными условиями, определив его как среднее по всем параллельным сечениям.

42. Записать уравнения движения молекулярной системы с периодическими граничными условиями, поддерживающие в ней заданные внешнее давление и температуру (NPT ансамбль). Использовать для этого баростат Берендсена и столкновительный термостат.
43. По какому закону меняются размеры расчетной ячейки с периодическими граничными условиями при использовании баростата Берендсена? Выписать соответствующее дифференциальное уравнение.

*К лекциям 10-11 (Моделирование биологических мембран):*

44. Опишите устройство фосфолипидной мембраны и приготовление модельного гидратированного фосфолипидного бислоя. Как ставится молекулярно-динамический вычислительный эксперимент? Какие задаются начальные и граничные условия? Опишите этапы релаксации системы и приведение ее к заданным термодинамическим характеристикам. Приведите примеры величин, которые могут быть вычислены в ходе проведения вычислительного эксперимента. Как можно судить, что моделируемая система достигла предстационарного состояния и ее конфигурацию можно задавать в качестве начальных данных для расчета продуктивной траектории?
45. Приведите пример потенциальной функции, описывающей взаимодействие атомов с непроницаемой поверхностью бесконечного цилиндра. Рассмотрите случаи как чисто отталкивающих стенок, так и сорбирующих стенок. Каким образом отразится на уравнениях движения молекулярной системы наличие такого цилиндра?
46. Опишите постановку молекулярно-динамического вычислительного эксперимента по созданию цилиндрической полости, заданного радиуса, в фосфолипидном бислое.
47. Опишите постановку молекулярно-динамического вычислительного эксперимента по заключению (сжатию) макромолекулы в цилиндрическую полость, заданного радиуса.
48. Опишите возможные этапы по приготовлению и проведению молекулярно-динамических вычислительных экспериментов гидратированного фосфолипидного бислоя с включением в него каналобразующего пептида грамицидина А.
49. Сконструируйте потенциальную функцию, описывающую взаимодействие атомов с непроницаемым сфероцилиндром. Как может выглядеть вычислительный эксперимент по выращиванию полости в форме сфероцилиндра в уже имеющейся модельной молекулярной системе?

*К лекциям 12-13 (Силовое разворачивание белковых глобул):*

50. Опишите постановку молекулярно-динамических вычислительных экспериментов по силовому разворачиванию белковой глобулы в вакууме. Каким образом задать или откуда получить координаты атомов в нативной структуре макромолекулы? Каким образом ввести в уравнение движения, описывающие внутримолекулярную динамику, внешние силы? Как моделировать растяжение макромолекулы за концы с предписанной скоростью?
51. Предложите процедуру получения гидратированного состояния белковой глобулы. Как поступить, чтобы в процессе релаксации внешнего гидратного слоя сильно неравновесное состояние молекулярной системы не привело к разрушению нативной структуры белковой глобулы?
52. Опишите, каким образом можно дополнить модельную молекулярную систему, представляющую собой гидратированную белковую глобулу, внешней замкнутой оболочкой с непроницаемой отталкивающей поверхностью, обеспечивающей отражение достигших ее испарившихся молекул воды и возвращение их обратно в гидратную оболочку? Рассмотрите случай такой оболочки в форме сфероцилиндра. Какие размеры сфероцилиндра следует задавать, и как может ставиться вычислительный эксперимент?

*К лекциям 14-15 (Постановка молекулярно-динамических расчетов с дендримерами):*

53. Опишите, как устроены макромолекулы, получившие название дендримеров. Перечислите их структурные элементы. Приведите пример конкретного дендримера.
54. Опишите процедуру возможного конструктора дендримеров. Каким образом можно избежать сильных стерических перекрываний участков конструируемой структуры? Как получить структуру типа “одуванчика”?
55. Опишите постановку и проведение молекулярно-динамического вычислительного эксперимента с дендримером в водной среде. Сформулируйте возможные вопросы, которые могут изучаться в подобного рода вычислительных экспериментах.

#### Итоговый экзаменационный тест

Номер модуля	48		
Формулировка вопроса	Тип вопроса	Варианты ответов	Ваш комментарий
Какие представления лежат в основе метода молекулярной динамики?	Выбор одного значения	= <b>Представление молекулярного объекта в виде системы взаимодействующих материальных частиц, движение которых описывается классическими уравнениями Ньютона;</b> = Описание молекулярной динамики с помощью временного уравнения Шредингера.	Правильный ответ выделен
Все ли из указанных действий относятся к постановке и проведению молекулярно-динамического вычислительного эксперимента?	Ответ да/нет	<b>Задание координат и скоростей всех атомов; Задание таблицы параметров атомов (их типы, атомные массы, заряды); задание параметров силового поля</b>	Ответ да
Приведите названия нескольких программных комплексов, широко используемых для моделирования молекулярной динамики биомолекулярных систем	Ввести значения	<b>AMBER, GROMOS, GROMACS, CHARMM, ПУМА, PUMA, NAMD, Tinker, DL_POLY, LAMMPS, NWCHEM</b>	Правильным считается ответ, содержащий хотя бы одно из указанных значений.
1 кг воды при нормальных условиях занимает объем 1 литр. Найдите объем, приходящийся в среднем на одну молекулу воды. Ответ дайте в $\text{Å}^3$ с округлением до целого.	Ввести значение	<b>30</b>	$30 \text{ Å}^3$
Оцените линейный размер молекулы воды, считая, что молекулы расположены в узлах простой кубической решетки. Ответ дайте в ангстремах с одним зна-	Ввести значение	<b>3.1</b>	$3.1 \text{ Å}$

ком после запятой.			
Установите соответствие для характерных единиц, используемых при описании динамики молекулярной системы	Установить соответствие	1. Масса (а) пс ( $10^{-12}$ с) 2. Длина (расстояние) (б) нм ( $10^{-9}$ м) <u>или</u> Å ( $10^{-10}$ м) 3. Время (в) кДж/моль <u>или</u> ккал/моль 4. Энергия (г) а.е.м. ( $1,67 \cdot 10^{-27}$ кг)	1 – г 2 – б 3 – а 4 – в
В малых молекулярных системах (кластерах), содержащих сотни или тысячи атомов, условия для атомов в приповерхностных слоях и в объеме сильно различаются. Пусть атомы располагаются в узлах простой кубической решетки и образуют куб $10 \times 10 \times 10$ . Найдите долю атомов, расположенных на поверхности куба. Ответ запишите в процентах	Ввести значение	<b>48.8</b>	48.8 %
Расчетная ячейка с периодическими граничными условиями имеет границы $[0, L_x)$ . Привести формулу для определения X-координаты образа частицы в расчетной ячейке $x_0$ , если ее текущее значение $x_t$ .	Ввести значение	$x_0 = x_t - [x_t / L_x] \cdot L_x$	Здесь $[x]$ означает округление $x$ до ближайшего целого в меньшую сторону – целая часть числа $x$ .
Полимерная молекула в разбавленном растворе имеет состояние клубка. Для моделирования ее поведения была предложена модель, в которой полимер был представлен цепочкой из 100 шаров диаметра 1, соединенных валентными связями длины 1, а растворитель – простыми шарами диаметра 1. Расчетная ячейка была взята в форме куба с периодическими граничными условиями. Оцените общее число шаров, кото-	Ввести значение	1 000 000	$100 \times 100 \times 100$

<p>рое необходимо поместить в расчетную ячейку для того, чтобы в процессе тепловых флуктуаций полимерного клубка сохранялись условия разбавленного раствора, то есть, чтобы полимер не имел контактов с образами полимера в соседних ячейках</p>			
<p>При описании межмолекулярных взаимодействий используют потенциалы: 1) Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий; 2) кулоновских взаимодействий; 3) валентных связей, 4) валентных углов; 5) торсионных углов; 6) плоских групп. Поставьте в соответствие этим взаимодействиям приведенные формулы.</p>	<p>Установить соответствие</p>	<p>(а) <math>u = K_l(l - l_0)^2</math>  (б) <math>u = K_\theta(\theta - \theta_0)^2</math>  (в) <math>u = K_\varphi[1 \pm \text{Cos}(n\varphi)]</math>  (г) <math>u = K_\psi[1 - \text{Cos}(n\psi)]</math>  (д) <math>u = \frac{q_1 q_2}{\epsilon_0 r}</math>  (е) <math>u = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]</math></p>	<p>1 – е  2 – д  3 – а  4 – б  5 – в  6 – г</p>
<p>Для описания невалентных взаимодействий используется потенциал Леннард-Джонса в одном из двух представлений:</p> $u = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$ <p>и</p> $u = \epsilon \left[ \left( \frac{r_{\min}}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_{\min}}{r} \right)^6 \right]$ <p>Найдите соответствие между параметрами в этих двух формулах.</p>	<p>Ввести значение</p>	<p><math>r_{\min} = 2^{1/6} \sigma</math></p>	<p><math>r_{\min} = 2^{1/6} \sigma</math></p>
<p>Выпишите формулы (комбинационные правила) для параметров Ван-дер-ваальсовых взаимодействий <math>\epsilon_{ab}</math> и <math>\sigma_{ab}</math> частиц разных сортов (а и b) через значения этих параметров для каждого из сортов.</p>	<p>Ввести значения</p>	<p><math>\epsilon_{ab} = (\epsilon_{aa}\epsilon_{bb})^{0.5}</math>  <math>\sigma_{ab} = 0.5 \cdot (\sigma_{aa} + \sigma_{bb})</math></p>	<p><math>\epsilon_{ab} = (\epsilon_{aa}\epsilon_{bb})^{0.5}</math>  <math>\sigma_{ab} = 0.5 \cdot (\sigma_{aa} + \sigma_{bb})</math></p>

<p>Потенциал валентной связи между атомами <math>i</math> и <math>j</math> задан в форме <math>u_b = K(r - b_0)</math>, где <math>r =  \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i </math> – расстояние между этими атомами, а <math>b_0</math> – ее равновесная длина. Выведите формулу для вклада в действующие на атом <math>i</math> силы <math>\mathbf{f}_i</math> со стороны этой валентной связи.</p>	<p>Ввести значение</p>	$\mathbf{f}_i = 2K_l(r - b_0) \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{r}$	<p>Поскольку набор формул и проверка их правильности вызывают трудности, можно рассмотреть вариант отдельного сплошного списка формул по всем заданиям, из которого нужно будет выбрать подходящую формулу.</p>
<p>Невалентное взаимодействие между частицами <math>i</math> и <math>j</math> задано потенциалом Леннарда-Джонса в форме <math>u = \varepsilon \left[ \left( \frac{r_{\min}}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_{\min}}{r} \right)^6 \right]</math>, где <math>r =  \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j </math> – расстояние между атомами. Вывести формулы для вкладов в силы, действующие на атомы, со стороны этого взаимодействия</p>	<p>Ввести значение</p>	$\mathbf{f}_i = 24\varepsilon \left[ \left( \frac{r_{\min}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{r_{\min}}{r} \right)^6 \right] \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r^2},$ $\mathbf{f}_j = -\mathbf{f}_i$	
<p>При вычислении невалентных взаимодействий в каком из двух методов трудоемкость пропорциональна <math>N</math>, в противоположность другому, в котором она пропорциональна <math>N^2</math>?</p>		<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Метод Верле составления списка взаимодействующих пар;</li> <li>2. <b>Метод сканирования пространства</b></li> </ol>	
<p>При моделировании системы из 12 частиц на плоскости для поиска невалентных взаимодействий используется метод сканирования пространства. Для этого расчетная ячейка разбивается на <math>9=3 \times 3</math> элемен-</p>	<p>Ввести значения</p>	<p><u>Главный</u>: 2,0,7,0,1,4,0,5,0</p> <p><u>Присоединенный</u>: 0,3,6,8,10,9,0,0,12,11,0,0</p>	

тарных ячеек. Выписать главный и присоединенный массивы, если заполнение элементарных ячеек имеет следующий вид: №1: 2,3,6,9; №3: 7; №5: 1; №6: 4,8; №8: 5,10,11; №9: 12			
Для нахождения траекторий молекулярной динамики используются разные алгоритмы, дающие одну и ту же временную зависимость координат атомов. Установить соответствие между названиями алгоритмов и отвечающих им формул для вычисления координат и скоростей частиц на шаге.	Установить соответствие	1. Алгоритм Верле (простейшая разностная аппроксимация); 2. Алгоритм с перескоками (leap-frog алгоритм); 3. Скоростной алгоритм Верле.	1 – Б 2 – А 3 – В
		<u>A:</u> $\mathbf{v}_i(t + 0.5h) = \mathbf{v}_i(t - 0.5h) + \mathbf{a}_i(t)h$ $\mathbf{r}_i(t + h) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + 0.5h)h$ <u>B:</u> $\mathbf{r}_i(t + h) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t - h) + \mathbf{a}_i(t)h^2$ <u>B:</u> $\mathbf{r}_i(t + h) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)h + 0.5\mathbf{a}_i(t)h^2$ $\mathbf{v}_i(t + h) = \mathbf{v}_i(t) + 0.5[\mathbf{a}_i(t) + \mathbf{a}_i(t + h)]h$	
Все взаимодействия в молекулярной системе задаются потенциальными функциями. При расчете в термостате с заданной температурой будет ли средняя кинетическая энергия атома (а) зависеть от его типа; (б) от положения атома в структуре молекулы; (в) от параметров потенциалов (жесткие или мягкие взаимодействия)?	Ответ да/нет	(а) да/нет? (б) да/нет? (в) да/нет?	
Чему равна средняя кинетическая энергия в среднем на одну частицу в молекулярной системе, взаимодействующей с термостатом, имеющем температуру T?	Выбрать значение	0.5·kT 1.0·kT <b>1.5·kT</b>	3kT/2
Для термостатирования молекулярной системы используются различные модификации уравнений Ньютона. Установить	Установить соответствие	(а) $\frac{dr_{i,\alpha}}{dt} = v_{i,\alpha}$	1 – д 2 – г 3 – б 4 – в 5 – а

<p>соответствие выписанных уравнений движения следующим методам и подходам:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Столкновительная динамика;</li> <li>2) Броуновская динамика;</li> <li>3) Термостат Берендсена;</li> <li>4) Термостат Нозе-Гувера;</li> <li>5) Изотермическая молекулярная динамика (метод масштабирования)</li> </ol>		$m_i \frac{dv_{i,\alpha}}{dt} = F_{i,\alpha} - \zeta \cdot v_{i,\alpha}$ $\zeta = \frac{\sum_{i,\alpha} F_{i,\alpha} v_{i,\alpha}}{\sum_{i,\alpha} v_{i,\alpha}^2}$ <p>(б)</p> $\frac{dr_{i,\alpha}}{dt} = v_{i,\alpha}$ $m_i \frac{dv_{i,\alpha}}{dt} = F_{i,\alpha} - \beta_T \left( \frac{T_{ref}}{T} - 1 \right) \cdot v_{i,\alpha}$ $T = \frac{1}{3N} \sum_{i,\alpha} m_i v_{i,\alpha}^2$ <p>(в)</p> $\frac{dr_{i,\alpha}}{dt} = v_{i,\alpha}$ $m_i \frac{dv_{i,\alpha}}{dt} = F_{i,\alpha} - \zeta \cdot m_i v_{i,\alpha}$ $\frac{d\zeta}{dt} = \frac{f}{Q} (T - T_{ref})$ <p>(г)</p> $\frac{dr_{i,\alpha}}{dt} = v_{i,\alpha}$ $m_i \frac{dv_{i,\alpha}}{dt} = -\zeta \cdot m_i v_{i,\alpha} + F_{i,\alpha} + A_{i,\alpha}$ $\langle A_{i,\alpha}(t) \rangle = 0$ $\langle A_{i,\alpha}(t) A_{j,\beta}(t') \rangle = 2T\zeta \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t')$ <p>(д)</p> $\frac{dr_{i,\alpha}}{dt} = v_{i,\alpha}$ $m_i \frac{dv_{i,\alpha}}{dt} = F_{i,\alpha} + \sum_k f_{ik,\alpha} \delta(t - t_{ik})$ $P(\mathbf{v}_0) = \left( \frac{m_0}{2\pi T_{ref}} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{m_0 \mathbf{v}_0^2}{2T_{ref}} \right)$	
<p>Для вычисления давления в молекулярной системе со стенками (случай 1) и периодическими граничными условиями (случай 2) используются различные формулы:</p> <p>(а)</p> $P_x = \frac{NkT}{V} + \frac{1}{V} \langle \sum x_i F_{i,x} \rangle$ <p>(б)</p>	<p>Выбрать значение</p>	<p>1-й случай: <b>а и б</b>; 2-й случай: <b>только б</b>.</p>	

$P_x = \frac{NkT}{V} + \frac{1}{V} \left\langle \sum_{i < j} (x_j - x_i) f_{ij} \right\rangle$ <p>В каком из перечисленных случаев какие из формул могут быть применены?</p>			
<p>Для моделирования конденсированной молекулярной системы с периодическими граничными условиями в NPT ансамбле уравнения движения взяты в виде:</p> $\frac{dr_{i,\alpha}}{dt} = v_{i,\alpha} + \beta_\alpha (P_\alpha(t) - P_{\alpha,ref}) r_{i,\alpha}$ $m_i \frac{dv_{i,\alpha}}{dt} = F_{i,\alpha} + \sum_k f_{ik,\alpha} \delta(t - t_{ik})$ <p>(баростат Берендсена и столкновительный термостат). Выпишите уравнения для изменения размеров расчетной ячейки <math>L_\alpha</math>, <math>\alpha = \{x, y, z\}</math>, вытекающие из уравнений движения.</p>	<p>Написать формулу</p>	<p>Уравнения для изменения размеров расчетной ячейки:</p> $\frac{dL_\alpha}{dt} = \beta_\alpha (P_\alpha(t) - P_{\alpha,ref}) L_\alpha$	

### Итоговая государственная аттестация

Обучение заканчивается защитой магистерской диссертации, которая должна представить собой небольшой научный инновационный проект, обеспеченный определенным финансированием. При выполнении проекта магистрант должен продемонстрировать не только знания и умения в выбранной научной области, но и навыки управления инновационным проектом.

### Требования к квалификационной работе магистра

*Требования к квалификационной работе, учитываемые при ее оценке в процессе итоговой государственной аттестации Магистра в классических университетах России:*

№	Оценка квалификационной работы складывается из оценок членов ГАК по следующим пунктам:	Компетенции магистра, согласно ФГОС НП по направлению «Биология»:
1.	Постановка общенаучной проблемы, оценка ее актуальности, обоснование задачи исследования.	Способность порождать новые идеи, выявлять фундаментальные проблемы, формулировать задачи и намечать пути исследования
2.	Качество обзора литературы (широта кругозора, знание иностранных языков, навыки управления информацией).	Способность использовать современные методы обработки и интерпретации научной информации
3.	Выбор и освоение методов: планирование экспериментов (владение аппаратурой, информацией, информационными технологиями).	Способность самостоятельно выполнять исследование, использовать современную аппаратуру и вычислительные средства, навыки работы в коллективе, способность к

		профессиональной адаптации
4.	Научная достоверность и критический анализ собственных результатов (ответственность за качество; научный кругозор). Корректность и достоверность выводов.	Ответственность за качество выполняемых работ
5.	Качество презентации (умение формулировать, докладывать, критически оценивать результаты и выводы своей работы, вести дискуссию).	Способность профессионально оформлять и представлять результаты исследований, способность к самокритике

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО с учетом рекомендаций и ПрООП ВПО по направлению и профилю подготовки 020400 «Биология»

**Разработчики программы:**

Биологический ф-т МГУ  
имени Ломоносова

профессор

Н.К. Балабаев

профессор

К.В. Шайтан