

RTU studiju kurss "Molekulārā datormodelēšana"

32000 Dabaszinātņu un tehnoloģiju fakultāte

Vispārējā informācija

Kods	DA0012
Nosaukums	Molekulārā datormodelēšana
Studiju kursa statuss programmā	Obligātais/Ierobežotās izvēles; Brīvās izvēles
Atbildīgais mācītbspēks	Inese Mieriņa - Doktors, Vadošais pētnieks
Apjoms daļās un kredītpunktos	1 daļa, 3.0 kredītpunkti
Studiju kursa īstenošanas valodas	LV
Anotācija	Studiju kursa ietvaros students apgūs nepieciešamās zināšanas un nostiprinās tās praksē, risinot problēmu uzdevumus par kvantu ķīmijas pielietojumu reakciju mehānismu prognozēšanā, organisko molekulu un proteīnu dokingā, kā arī molekulārajā dinamikā.
Mērķis un uzdevumi, izteikti kompetencēs un prasmēs	Studiju kursa mērķis ir dot studentiem sapratni par teorētisko aprēķinu pielietojumu organiskās un medicīnās ķīmijas problēmas risināšanā. Studiju kursa uzdevumi: - dot zināšanas par kvantu aprēķinu pielietojumu reakciju pētījumos un veicināt kritisku iegūto datu izvērtēšanu; - dot izpratni par proteīnu un ligandu dokingu; - dot zināšanas par molekulārās dinamikas datoraprēķiniem.
Patstāvīgais darbs, tā organizācija un uzdevumi	Uzdevumu risināšana.
Literatūra	Obligātā. / Obligatory: Cook, David B.. Quantum chemistry : a unified approach /David B. Cook. London [etc.] : Imperial College Press : Distributed by World Scientific Pub., c2012., xvi, 313 lpp. : il. ; 24 cm. Papildu. / Additional: Ira N. Levine. Quantum Chemistry Pearson advanced chemistry series Pearson, 2014
Nepieciešamās priekšzināšanas	Organiskā ķīmija. Fizikālā ķīmija.

Studiju kursa saturs

Saturs	Pilna un nepilna laika klātienēs studijas		Nepilna laika neklātienēs studijas	
	Kontakt stundas	Patstāv. darbs	Kontakt stundas	Patstāv. darbs
Ab initio kvantu ķīmijas aprēķini. Kvantu ķīmijas aprēķinu pamatprincipi, uzdevumu sastādīšana un rezultātu apstrādes pamati. Organisko vielu konformāciju lokālie un globālie minimumi. Ķīmisko reakciju pārejas stāvokļu atrašana. HOMO un LUMO orbitāļu enerģiju aprēķināšana un vizualizācija.	4	2	0	0
Laboratorijas darbi par Organisko savienojumu konformāciju analīzi. Stacionāro punktu optimizācija. Ķīmiskās pārvērtības potenciālās enerģijas virsmas analīze.	12	8	0	0
Organisko molekulu un proteīnu dokingi. Liganda un proteīna dokinga pamatprincipi. Ligandu un proteīnu ievadfailu sagatavošana un apstrāde. Dokinga aprēķinu rezultātu apstrāde un vizualizācija.	2	1	0	0
Laboratorijas darbi par ligandu un proteīna dokinga aprēķiniem. Aprēķinu rezultātu izvērtēšana un vizualizācija.	6	7	0	0
Molekulārā dinamika. Molekulārās dinamikas aprēķinu pamatprincipi. Ievadfailu sagatavošana un apstrāde. Molekulārās dinamikas aprēķinu rezultātu apstrāde un vizualizācija.	2	1	0	0
Laboratorijas darbi par molekulārās dinamikas aprēķinu rezultātu izvērtēšanu un vizualizāciju.	6	7	0	0
Eksāmens.	2	20	0	0
Kopā:	34	46	0	0

Sasniedzamie studiju rezultāti un to vērtēšana

Sasniedzamie studiju rezultāti	Rezultātu vērtēšanas metodes
Pārzina kvantu ķīmisko aprēķinu pamatprincipus.	Laboratorijas darbi. Students sastāda kvantu ķīmijas aprēķina uzdevumu un apstrādā iegūtos rezultātus
Izprot un spēj pielietot ab initio kvantu aprēķinus ķīmisko reakciju mehānismu prognozēšanā.	Eksāmens. Laboratorijas darbi. Students veic organisko savienojumu konformāciju analīzi, optimizē stacionāros punktus un analizē potenciālās enerģijas virsmas.

Izprot ligandu un proteīnu dokingu.	Eksāmens. Laboratorijas darbi. Students veic liganda un proteīna dokinga aprēķinus, vizualizē un izvērtē rezultātu.
Izprot molekulāro dinamiku.	Eksāmens. Laboratorijas darbi. Students veic molekulārās dinamikas aprēķinu un rezultātu vizualizāciju un izvērtē rezultātus.

Studiju rezultātu vērtēšanas kritēriji

Kritērijs	% no kopējā vērtējuma
Laboratorijas darbi	50
Eksāmens	50
Kopā:	100

Studiju kursa plānojums

Daļa	KP	Stundas			Pārbaudījumi			Brīvās izvēles pārbaudījumi		
		Lekcijas	Prakt d.	Laborat	Ieskaite	Eksām.	Darbs	Ieskaite	Eksām.	Darbs
1.	3.0	8.0	0.0	24.0		*			*	