

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Обчислювальна біологія

(повна назва дисципліни)

для студентів

галузь знань	16 «Хімічна та біоінженерія» <i>(шифр і назва)</i>
спеціальність	162 Біотехнології та біоінженерія <i>(шифр і назва спеціальності)</i>
освітній рівень	магістр <i>(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)</i>
освітня програма	Високі технології (біотехнологія) <i>(назва освітньої програми)</i>
вид дисципліни	<u>вибіркова</u>

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	3
Кількість кредитів ECTS	4.0
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладач: Войтешенко Іван Сергійович, к.ф.-м.н., асистент кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

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

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

КИЇВ – 2021

Розробники:

Войтешенко Іван Сергійович, к.ф.-м.н., асистент кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

 Олексій НИПОРКО

Протокол № 7 від «25» лютого 2021р.

Схвалено науково - методичною комісією

Інституту високих технологій

Київського національного університету імені Тараса Шевченка

Протокол від «25» березня 2021 року № 3

Голова науково-методичної комісії  Наталя РУСІНЧУК

«25» 03 2021 року

ВСТУП

1. Мета дисципліни – є ґрунтовне вивчення причин просторової будови, структурно-динамічних властивостей основних класів низькомолекулярних сполук та біополімерів методами сучасних розрахункових фізико-хімічних методів досліджень.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни (за наявності):

1. Знати основні поняття теорії квантової механіки, основи хімії низькомолекулярних сполук та полімерів, основні закономірності курсів молекулярної фізики, оптики, електрики, атомної та ядерної фізики.
2. Вміти застосовувати основні методи прикладної квантової механіки та хімії для розрахунку типових задач, що мають аналітичні розв'язки.
3. Володіти основним апаратом лінійної алгебри та тензорним аналізом, основами програмування та алгоритмізації.

3. Анотація навчальної дисципліни:

Предметом навчальної дисципліни «Обчислювальна біологія» є вивчення структурно-динамічних властивостей низькомолекулярних сполук та основних класів біополімерів сучасними розрахунковими методами.

У курсі детально розглядаються найбільш поширені підходи до вивчення просторової будови, структурно-динамічних властивостей низькомолекулярних сполук, основних класів біополімерів, їхніх основних фізико-хімічних підвалин функціонування та конформаційних змін методами *ab initio*.

4. Завдання (навчальні цілі):

Навчання дисципліни має на меті розвинути у студентів такі компетентності:

K01. Здатність проведення досліджень на відповідному рівні.

K02. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

K08. Здатність здійснювати пошук необхідної інформації в науковій і технічній літературі, базах даних та інших джерелах.

K11. Здатність розробляти нові біотехнологічні об'єкти і технології та підвищувати ефективність існуючих технологій на основі експериментальних та/або теоретичних досліджень та/або комп'ютерного моделювання, в тому числі методів біоінформатики.

K13. Здатність розробляти та вдосконалювати комплексні біотехнології на основі розуміння наукових сучасних фактів, концепцій, теорій, принципів і методів біоінженерії та природничих наук.

K14. Здатність прогнозувати напрямки розвитку сучасної біотехнології в контексті загального розвитку науки і техніки.

K19. Здатність знаходити адекватні шляхи розв'язання наукових проблем у галузі біотехнології та біоінженерії.

K23. Здатність розробляти/застосовувати комбіновані біотехнології за допомогою міждисциплінарних підходів, зокрема, з використанням технологій матеріалознавства та хімічних технологій.

K24. Здатність застосовувати методи біоінформатики та обчислювальної структурної біології для раціонального дизайну (біо)молекул та матеріалів з заданою біологічною активністю.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Знати та вміти моделювати будову, структурно-динамічні властивості низькомолекулярних сполук та біополімерів: нуклеїнових кислот та білків, Значи сучасні фізико-хімічні розрахункові методи. Ознайомлення зі спеціальним програмним забезпеченням для розрахунків або оцінювання необхідних параметрів низькомолекулярних сполук та біополімерів. Вивчення основ ОС	лекції	теоретичні запитання на заліку (тестова форма)	40

	<i>Linux та реалізація алгоритмів.</i>			
2.1	<i>Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для розрахунків або оцінювання необхідних параметрів низькомолекулярних сполук та біополімерів. Опису їхніх конформаційних змін та основ функціонування. Вивчення основ ОС Linux та реалізація алгоритмів.</i>	<i>практичні роботи</i>	<i>звіти по практичних роботах</i>	<i>30</i>
4.1	<i>Приймати та обґрунтувати рішення щодо вибору типу моделі, підходів моделювання та програмного комплексу для описання фізичних, біологічних чи хімічних процесів, у тому числі, складних систем.</i>	<i>лекції, практичні роботи, самостійна робота студента</i>	<i>звіти по практичних роботах включаючи самостійно опрацьовані матеріали</i>	<i>30</i>

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни		
	1.1	2.1	4.1
ПР05. Знати молекулярну організацію та регуляцію експресії генів, реплікації, рекомбінації та репарації, рестрикції та модифікації генетичного матеріалу у про- та еукаріотів, стратегію створення рекомбінантних ДНК для цілеспрямованого конструювання біологічних агентів.	+	+	+
ПР08. Планувати та управляти науково-дослідними, науково-технічними та/або виробничими проектами у галузі біотехнології, базуючись на сучасних тенденціях розвитку науки, техніки та суспільства.		+	+
ПР11. Вільно спілкуватися усно і письмово державною та іноземною мовами, обговорювати з фахівцями і нефахівцями результати досліджень, інновації та/або управління виробництвом і біотехнології.		+	+
ПР18. Знаходити необхідну інформацію у науковій та довідниковій літературі, електронних базах, інших джерелах інформації, оцінювати її релевантність та достовірність.		+	+
ПР19. Оцінювати актуальність досліджуваних наукових проблем, придатність відомих наукових методів для їх дослідження на основі аналізу наявних даних та публікацій у провідних виданнях.	+	+	+
ПР25. Застосовувати сучасні технології матеріалознавства та хімічні технології для розробки/використання новітніх комбінованих біотехнологій.		+	+
ПР26. Застосовувати методи біоінформатики та обчислювальної структурної біології для раціонального дизайну (біо)молекул та матеріалів з заданою біологічною активністю.	+	+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

семестрове оцінювання:

1. Звіти по практичних роботах: РН 2.1. - 30 балів/10 балів.
2. Самостійна семестрова робота: РН 4.1 - 30 балів/10 балів.
3. Письмовий залік: 1 тестове завдання 20 питань по 2 бали (40 балів/0 балів, оцінює РН 1.1).

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	60	100
Всього	60	100

7.2 Організація оцінювання:

Протягом семестру студенти виконують практичні роботи, за результатами чого готують письмові та усні звіти.

Протягом семестру студенти працюють над виконанням самостійної роботи, необхідні знання та навички для виконання якої отримують під час лекційних та практичних занять. Результатом виконання самостійної роботи є висновки та аналіз практичних робіт.

Для студентів, які упродовж семестру не досягли мінімального рубіжного рівня оцінки (36 балів), для одержання допуску до заліку обов'язковим є виконання додаткових завдань.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ п/п	Назва теми*	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
<i>Назва розділу чи частини I (якщо здійснюється поділ)</i>				
1	<p>Вступ. Тема 1 Обчислювальна хімія як наука. Предмет і головні задачі обчислювальної хімії. Об'єкти досліджень обчислювальної хімії. Програмні пакети, що дозволяють реалізовувати дослідження в області обчислювальної хімії. Основи ОС Linux, алгоритми, командний рядок.</p> <p>Практичне заняття: «Знайомство з допоміжним програмним забезпеченням (пз) gaussview та chemcraft, формування завдань для розрахунків»</p>	2	2	8
2	<p>Тема 2. Міжмолекулярні взаємодії і сили, які стабілізують низькомолекулярні сполуки та основні класи біополімерів. Методи вивчення міжмолекулярних взаємодій. емпіричні потенціали міжчастинкової взаємодії.</p> <p>Практичне заняття: «Розрахунки енергії та оптимізація молекул отриманих в лб № 1»</p>	4	2	12
3	<p>Тема 3. Ab initio моделювання низькомолекулярних сполук та основних класів біополімерів. Методи квантово-хімічного моделювання. ППЕ та коливальний аналіз.</p> <p>Практичне заняття: «Розрахунки енергії дисоціації двохатомних молекул та енергії зв'язків багатоатомних молекул»</p>	4	2	12
4	<p>Тема 4. Базисні функції. Різновиди квантово-хімічних методів. Програмні реалізації квантово-хімічного моделювання.</p> <p>Практичне заняття: «Побудова молекулярних орбіталей молекул»</p>	2	2	12
5	<p>Тема 5. Перехідні стани, пошук та опис: дослідження за прикладі пакету - Gaussian властивостей молекул та реакцій в газовій фазі та розчині, шляхи протікання реакцій.</p> <p>Практичне заняття: «Сканування поверхні потенційної енергії»</p>	4	2	12
6	<p>Тема 6. Внутрішньомолекулярне та міжмолекулярне зв'язування. Теорія атомів у молекулах.</p> <p>Практичне заняття: «Розрахунок порядку зв'язків деяких вуглеводнів»</p>	4	2	12
7	<p>Тема 7. Дослідження збуджених станів, конфігураційних простір, ППЕ збуджених станів, дисоціація та молекулярні орбіталі.</p> <p>Практичне заняття: «Розрахунок шляхів хімічних реакцій»</p>	4	4	12
8	ВСЬОГО	24	16	80

*Примітка: слід зазначити також теми, винесені на самостійне вивчення

Загальний обсяг 120 год., в тому числі (вибрати необхідне):

Лекцій – **24 год.**

Практичні заняття - **16 год.**

Самостійна робота - **80 год.**

9. Рекомендовані джерела:

Основна:

1. Давидовська Т.Л., Цимбалюк О.В., Войтешенко І.С., Грабчук Г.П. та ін. Фізика біосистем, КОМПРИНТ, 2016
2. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. 4-те вид., доп. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. 872 с
3. Foresman J. B. Exploring chemistry with electronic structure methods. 2-nd edition / J. B. Foresman, Æ. Frisch. – Gaussian, Inc., Pittsburg, PA, 1996. – 302 p.
4. J. B. Foresman and Æ Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015. ISBN: 978-1-935522-03-4
5. Richard Bader. Atoms in Molecules: A Quantum Theory. — USA: Oxford University Press, 1994. — ISBN 978-0-19-855865-1.
6. Ричард Бейдер. Атомы в молекулах. Квантовая теория. — М.: Мир, 2001. — 532 с. — ISBN 5-03-003363-7.
7. Соловьев М. М. Компьютерная химия / М. М. Соловьев, М. Е. Соловьев. – М. : Солон-пресс, 2005 . – 536 с.
8. Минкин В. И. Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – Ростов н/Д : Феникс, 1997. – 560 с.
9. Минкин В. И. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – М. : Химия, 1986. – 412 с.
10. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия / Н. Ф. Степанов. – М. : Мир, 2001. – 519 с.
11. Бандура Л. В. Неэмпирические расчеты кристаллов в атомном базисе с использованием интернет-сайтов и параллельных вычислений / А. В. Бандура, Р.А.Эварестов. — СПб. : Изд-во СПбГУ, 2004.
12. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики /Д. И. Блохинцев. — М. Лань, 2004.
13. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: Основы теории и работа с программами GAUSSIAN и GAUSSVIEW. Солон-пресс, 2011. -224 с.

Додаткова:

1. The official Gaussian website <http://www.gaussian.com/index.htm>
2. The official ORCA <http://website.orcaforum.kofo.mpg.de>
3. The official AIMALL website <http://aim.tkgristmill.com>
4. The official GAMESS website <https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/>
5. The official MULTIWFN website <http://sobereva.com/multiwfn/>
6. Ochterski Joseph W. Thermochemistry in Gaussian. Gaussian, Inc. 2000 –19 p.
7. Кантор Ч., Шиммел П. Биофизическая химия. - М.: Мир. 1984-1985. - Т. 1-3.
8. Романовский Ю.М., Степанова М.В., Чернавский Д.С. Математическая биофизика. - М.: Наука. 1984.
9. Васильев А.Н. Python на примерах. Практический курс по программированию. Издательство: "Наука и Техника", Санкт-Петербург, 2016 рік, 432 с.
10. Васильев А.Н. Самоучитель Matlab. Практический подход. Издательство: "Наука и Техника", Санкт-Петербург, 2012 рік, 448 с.
11. The Linux Documentation Project <http://www.tldp.org/>