

# КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

## Інститут високих технологій

### Кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Директор Інституту високих технологій

І. В. Комаров

«29» вересня 2021 року

## РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

### Актуальні питання структурної біології

для здобувачів наукового ступеня доктор філософії

галузь знань	09 Біологія
спеціальність	091 Біологія
рівень вищої освіти	третій освітньо-науковий
освітньо-наукова програма	"Молекулярна біотехнологія"
вид дисципліни	вибіркова

Форма навчання - очна (денна), заочна

Навчальний рік - 2021/2022

Курс - 2, півріччя - 2

Кількість кредитів ECTS - 4

Мова викладання, навчання

та оцінювання - українська

Форма заключного контролю - іспит

Викладачі:

Нипорко Олександр Юрійович

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ («\_\_\_\_») \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.  
на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ («\_\_\_\_») \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

КИЇВ – 2021

**Розробник:**

Нипорко Олексій Юрійович, к.б.н., доцент, кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики

«ПОГОДЖЕНО»

Завідувач кафедри молекулярної  
біотехнології  
та біоінформатики

  
О.Ю. Нипорко

Протокол № 2 від «16» вересня 2021 р.

Схвалено науково-методичною комісією Інституту високих технологій  
Київського національного університету імені Тараса Шевченка

Протокол № 1 від «29» вересня 2021р.

Голова науково-методичної комісії



Н.М. Русінчук

**1. Мета дисципліни** – навчити аспірантів орієнтуватися в сучасних концепціях обчислювальної структурної біології, дати детальні уявлення про просторову організацію та ієрархічність структури біологічних макромолекул, методи її відтворення та дослідження структурних змін в біологічних процесах, сформувати у аспірантів цілісний і системний й погляд на структурну організацію молекулярного рівня біологічних систем.

## **2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:**

Навчальна дисципліна «Актуальні питання структурної біології» є частиною вибіркового блоку дисциплін та базується на циклі дисциплін професійної та практичної підготовки бакалавра та магістра, а саме: “Молекулярна біологія”, “Сучасні інформаційні технології в біології”, “Біоінформатика”, “Біофізика”, “Основи обчислювальної структурної біології”.

Попередні вимоги:

*Аспірант повинен знати:* основні концепції відтворення просторової структури біополімерів та їх комплексів між собою та з низькомолекулярними сполуками, основні концепції аналізу їх просторової організації, основи дослідження поведінки макромолекул та їх структурних переходів та/або перетворень..

*Аспірант повинен вміти:* творчо використовувати у навчальній, дослідницькій та викладацькій діяльності знання щодо реконструкції просторової структури біополімерів та їх комплексів між собою та з низькомолекулярними сполуками, розраховувати поведінку і аналізувати особливості просторової структури та енергетичні параметри біомолекулярних комплексів, вміти цілісно і системно мислити..

## **3. Анотація навчальної дисципліни:**

Дисципліна «Актуальні питання структурної біології» належить до переліку дисциплін вільного вибору аспіранта. Вона забезпечує поглиблене вивчення аспірантами основних закономірностей просторової організації біомакромолекул та формування біомолекулярних комплексів та спрямована на формування фахових умінь експериментатора, особливо орієнтованих на обчислювальне передбачення просторової структури, поведінки та енергетичних перетворень, притаманних біомакромолекулярним системам, із застосуванням найсучасніших *in silico* технологій.

## **4. Завдання (навчальні цілі):**

1. Надати основні відомості курсу «Актуальні питання структурної біології», які складають важливу частину теоретичної та прикладної підготовки аспіранта за спеціальністю «Біологія».

2. Узагальнити та розширити відомі поняття курсів Молекулярна біологія”, “Сучасні інформаційні технології в біології”, “Біоінформатика”, “Біофізика”, “Основи обчислювальної структурної біології”, простежити взаємозв’язок об’єктів досліджень структурної біології з іншими компонентами підготовки; продемонструвати застосування теоретичних відомостей до розв’язання практичних та експериментальних задач;

3. Навчити застосовувати знання, уміння, навички використання інформаційних і комунікаційних технологій у професійній діяльності, розвивати логічне та аналітичне мислення аспірантів.

4. Навчити застосовувати знання та уміння у моделюванні для розробки й реалізації радіоелектронних пристроїв, систем, комплексів, телекомунікаційних та інформаційних систем.

5. Прищепити вміння розв’язувати прикладні задачі методами молекулярного моделювання.

## 5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1, знати; 2, вміти; 3, комунікація; 4, автономність та відповідальність)		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			
<b>1</b>	аспірант повинен <b>знати</b> :	лекційні заняття, заняття з використанням обчислювальних пакетів	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	до 45
1.1	Принципи організації просторової структури макромолекул	<i>лекція</i>	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	
1.2	Інструментальні підходи до визначення просторової структури біомакромолекул	<i>лекція</i>	=//=	
1.3	Методи реконструкції просторової структури макромолекул	<i>лекція</i>	=//=	
1.4	Критерії оцінки якості просторової структури білків	<i>лекція</i>	=//=	
1.5	Принципи розрахунків молекулярної динаміки макромолекулярних комплексів	<i>лекція</i>	=//=	
1.6	Сутність білок-білкових взаємодій та процесів їх асоціації/дисоціації/агрегації	<i>лекція</i>	=//=	
1.7	Методи докінга низькомолекулярних сполук	<i>лекція</i>	=//=	
1.8	Методи оцінки вільної енергії в процесі міжмолекулярних взаємодій	<i>лекція</i>	=//=	
1.9	Принципи рецептор-орієнтованого дизайну/пошуку біологічно активних сполук	<i>лекція</i>	=//=	
<b>2</b>	аспірант повинен <b>вміти</b> :	лекційні заняття, заняття з використанням обчислювальних пакетів	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	до 45
2.1	Реконструювати просторову структуру білків за допомогою <i>in silico</i> методів	=//=	=//=	
2.2	Проводити розрахунки молекулярної динаміки макромолекул та їх комплексів з низькомолекулярними сполуками	=//=	=//=	
2.3	Оцінювати зміни вільної енергії в процесах біомолекулярної взаємодії	=//=	=//=	
<b>3</b>	<b>комунікація</b>	лекційні заняття, заняття з використанням обчислювальних пакетів		до 5
3.1	Здатність грамотно будувати комунікацію, виходячи з мети і ситуації спілкування			
3.2	Здатність бути відповідальним за внесок в роботу команди при вирішенні проблеми	лекційні заняття з використанням роботи у підгрупах	оцінювання виконання завдань для самостійної	
<b>4</b>	<b>автономність та відповідальність</b>	лекційні заняття, заняття з використанням математичних пакетів	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	до 5
4.1	самостійність у навчанні та/або професійній діяльності			

## 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни (код)	Програмні результати навчання (назва)															
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	
ПРН1. Сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі біології, біотехнології та суміжних галузей знань	+	+	+	+	+	+	+	+	+							
ПРН2. Знання праць провідних зарубіжних вчених, наукових шкіл та фундаментальних праць у галузі дослідження, формулювання мети власного наукового дослідження в контексті світового наукового процесу	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+				
ПРН8. Вміння формулювати наукову проблему з огляду на сучасні наукові тенденції										+	+	+	+		+	
ПРН9. Формулювати робочі гіпотези та моделі досліджуваної проблеми										+	+	+	+	+	+	
ПРН10. Аналізувати наукові праці в галузі біології та суміжних наук, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання	+	+	+	+	+	+	+	+	+				+	+	+	
ПРН12. Здійснювати процедуру встановлення інформаційної цінності джерел шляхом порівняльного аналізу з іншими джерелами													+		+	
ПРН13. Визначати принципи та методи дослідження, використовуючи міждисциплінарні підходи										+	+	+	+	+	+	

## 7. Схема формування оцінки

**7.1. Форми оцінювання аспірантів:** рівень досягнення всіх запланованих результатів навчання визначається за результатами написання письмових контрольних робіт і за результатами виконання самостійних завдань. Вклад результатів навчання у підсумкову оцінку, за умови їх опанування на належному рівні і успішної здачі всіх лабораторних робіт наступний:

- результати навчання 1.1 – 1.9 [знання] до 45 %;
- результат навчання 2.1 – 2.3 [вміння] – до 45%;
- результат навчання 3.1 [комунікація] – до 5%;
- результат навчання 4.1 [автономність та відповідальність] – до 5%;

Форми оцінювання аспірантів:

- **семестрове оцінювання:** контроль здійснюється за таким принципом. Навчальний семестр має один змістовний модуль. Після завершення теми №6 проводиться письмова модульна контрольна робота. Обов'язковим для допуску до іспиту є: написання модульної контрольної роботи з кількістю балів не менше 12 та виступу з доповіддю на семінарі.
- **підсумкове оцінювання (у формі іспиту):** форма іспиту – письмово-усна. Екзаменаційний білет складається із 2 питань, питання оцінюються по 20 балів. Всього за іспиті можна отримати від 0 до 40 балів. Умовою досягнення позитивної оцінки за дисципліну є отримання не менш ніж 60 балів, оцінка за іспит не може бути меншою **24 балів**.
- **умови допуску до підсумкового іспиту:** умовою допуску до іспиту є отримання аспірантом сумарно не менше, ніж *критично-розрахунковий мінімум 36 балів* за семестр. Аспіранти, які протягом семестру сумарно набрали меншу кількість балів, ніж критично-розрахунковий мінімум **36 балів**, для одержання допуску до іспиту обов'язково повинні написати додаткову контрольну роботу.

У випадку відсутності аспіранта з поважних причин відпрацювання та перездачі модульних контрольних робіт здійснюються у відповідності до „Положення про організацію освітнього процесу у Київському національному університеті”

## 7.2. Організація оцінювання;

*Оцінювання за формами контролю:*

	<i>ЗМ</i>	
	<i>Min. – балів</i>	<i>Max. – балів</i>
Модульна контрольна робота	12	20
Виступ на семінарі	15	25
Виконання аспірантами самостійних робіт	9	15

*Орієнтований графік оцінювання:*

	<i>Орієнтовний період для здійснення відповідної форми оцінювання</i>
Модульна контрольна робота 1	травень
Виступ на семінарі	травень
Виконання аспірантами самостійних робіт	березень - червень
Добір балів/додаткова контрольна робота та/або доскладання домашніх завдань	червень
Іспит	червень

Розрахунок балів, які аспірант отримує при успішній здачі заліку:

	Змістовий модуль	Іспит	Підсумкова оцінка
<i>Мінімум</i>	<i>36</i>	<i>24</i>	<i>60</i>
<b>Максимум</b>	<b>60</b>	<b>40</b>	<b>100</b>

### 7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень, % / Marks, %
<b>Відмінно</b> / Excellent	90-100%
<b>Добре</b> / Good	75-89%
<b>Задовільно</b> / Satisfactory	60-74%
<b>Незадовільно</b> / Fail	0-59%

### 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекційних занять

№ з/п	Назва теми	У тому числі		
		Лекції	Практичні заняття	Самостійна робота
1.	Сучасні виклики в структурній біології. Експериментальні методи визначення структури макромолекул. Моделювання структури білків. Техніки гомологічного порівняльного моделювання. Методи <i>de novo</i> моделювання. Гібридні методи.	2		11
2.	Кількісна оцінки просторових властивостей білків. Удосконалення моделей просторової структури. Комп'ютерне моделювання поведінки білків.	2	2	11
3.	Класифікація і еволюція білкових структур. Молекулярна графіка.	2		10
4.	Структурні особливості активних сайтів ферментів. Атомістичне відтворення реакцій та перехідних станів.	2		11
5.	Білок-білкові взаємодії та процеси білкової самозборки. Функціональні рухи в біомолекулах.	2		11
6.	Моделювання структури та функції іонних каналів. Особливості молекулярної динаміки білків та нуклеїнових кислот.	2		11
7.	Комп'ютерний дизайн білків. Структурне моделювання в імунології.	2		10
8.	Методи докінга низькомолекулярних сполук. Дослідження пертурбацій вільної енергії в білок-лігандних взаємодіях.	2	2	11

9.	Комп'ютерна фармакологія і токсикологія. Обчислювальні методи дослідження метаболізму ліків та ксенобіотиків. Пошук нових білків-мішеней в масштабі протеому.	2		10
ЗАГАЛОМ		18	4	96

Загальний обсяг **120** год., в тому числі:

Лекцій – **18** - год.

Практичні заняття – **4** год.

Консультації – **2** год.

Самостійна робота - **96** год.

### **9. Рекомендовані джерела:**

1. Computational Structural Biology: Methods and Applications. edited by Torsten Schwede, by Manuel C. Peitsch. World Scientific Publishing Co Pte Ltd – Singapore/SG, 2008.

2. Integrative Structural Biology with Hybrid Methods. edited by Nakamura, H., Kleywegt, G., Burley, S., Markley, J.L. – Springer International Publishing, 2017.

3. Koča, J., Svobodová Vařeková, R., Pravda, L., Berka, K., Geidl, S., Sehnal, D., Otyepka, M. Structural Bioinformatics Tools for Drug Design. – Springer International Publishing, 2016.

4. Structural Bioinformatics. edited by Philip E. Bourne, Helge Weissig. Willey-Liss. – NewJersej, 2009.

5. Zhijun Wu. Lecture Notes on Computational Structural Biology. World Scientific Publishing Co Pte Ltd – Singapore/SG, 2008.

6. Computational Molecular Modelling in Structural Biology. edited by Tatyana Karabancheva-Christova, Christo Christov. Elsevier, 2018.