

# 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

### Сучасні аспекти молекулярної і квантової біофізики

#### 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:

Войтешенко Іван Сергійович

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

КИЇВ – 2021

**Розробник:**

Войтешенко Іван Сергійович, к.ф.- м.н., асистент, 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

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – є ознайомлення здобувачів з просторовою будовою, структурно-динамічними властивостями двох основних класів біополімерів - нуклеїнових кислот (НК), (ДНК, РНК) та білків і основними фізичними засадами їхнього біологічного функціонування, а також оволодіння студентами основними фізичними методами дослідження структурно-динамічних властивостей білків, НК та їхніх комплексів. Фізичної природи взаємодій, які визначають структурно-динамічні властивості біополімерів, включаючи конформаційні переходи та фізичні механізми їхнього функціонування у живій клітині.

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

1. *Основи фізичних закономірностей структурно-динамічної реалізації основних класів біополімерів та фізичний зміст моделей їхнього функціонування у клітині.*
2. *Знати основні поняття теорії квантової механіки, основи хімії низькомолекулярних сполук та полімерів, основні закономірності курсів молекулярної фізики, оптики, електрики, атомної та ядерної фізики.*
3. *Знати основні поняття та термінологію неорганічної та органічної хімії..*
4. *Володіти елементарними навичками роботи з хімічними та біологічними об'єктами та фізичними приладами.*

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

*Дисципліна «Сучасні аспекти молекулярної і квантової біофізики» належить до переліку дисциплін вільного вибору здобувача. Вона забезпечує поглиблене вивчення здобувачами 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)**

Навчання дисципліні має на меті розвивати у здобувачів такі компетентності:

#### Загальні компетентності:

1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК1);
2. Навички використання новітніх інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК-2);
3. Здатність проведення самостійних досліджень на сучасному рівні (ЗК3);
4. Здатність до пошуку, оброблення на аналізу інформації з різних джерел (ЗК-4);
5. Здатність генерувати нові ідеї (креативність) (ЗК-5);
6. Здатність працювати в міжнародному науковому просторі (ЗК-6);
7. Здатність розробляти та управляти науковими проектами (ЗК-7);
8. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях (ЗК -8);
9. Навички презентації наукових матеріалів та аргументів у письмовій та усній формі перед цільовою аудиторією (ЗК -11).

### 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			
1.1	Знати принципи організації просторової структури макромолекул, інструментальні підходи до визначення просторової структури біомакромолекул, методи дослідження просторової структури макромолекул, критерії оцінки просторової структури білків. Сутність білок-нуклеїнових взаємодій та процесів їх асоціації/дисоціації/агрегації. Методи конформаційного пошуку низькомолекулярних сполук Методи оцінки вільної енергії в процесі міжмолекулярних взаємодій.	лекції	теоретичні запитання на екзамені	20%
1.2	Знати структуру, енергетику та функції біологічних молекул. Знати енергетичні основи міжмолекулярного впізнання; хімічну будову та молекулярну структуру білків та нуклеїнових кислот; денатурацію і гібридизацію подвійної спіралі ДНК. Принципи розрахунків ab initio макромолекулярних комплексів.	лекції	теоретичні запитання на екзамені	20%
2.1	Вміти: самостійно проводити конформаційне дослідження структур за допомогою ab initio методів, проводити розрахунки ab initio молекул та їх комплексів, оцінювати зміни вільної енергії в процесах біомолекулярної взаємодії та реакції. Опрацювання оригінальних наукових статей по темам лекцій.	лекції, практичні	звіти	20%
3.1	Комунікація: в зв'язку з мультидисциплінарністю вміти працювати в групі при опануванні молекулярно біологічних методів дослідження білків, нуклеїнових кислот та їх комплексів з лігандами, аналізі отриманих даних. Здатність грамотно будувати комунікацію, виходячи з мети і ситуації спілкування. Здатність бути відповідальним за внесок в роботу команди при вирішенні проблеми.	лекції, практичні, самостійна робота здобувача	звіти, включаючи самостійно опрацьовані матеріали	20%
4.1	Прийняти обґрунтоване рішення щодо використання відповідного методу для вирішення реальних практичних задач молекулярної та квантової біофізики. Вміти самостійно працювати з ресурсами для отримання наукової та методичної інформації з молекулярної біології та інших напрямків дослідження геному.	лекції, практичні, самостійна робота здобувача	звіти, включаючи самостійно опрацьовані матеріали	20%

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

<b>Результати навчання дисципліни</b>	<b>1.1</b>	<b>1.2</b>	<b>2.1</b>	<b>3.1</b>	<b>4.1</b>
<b>Програмні результати навчання</b>					
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 здобувачів:

#### семестрове оцінювання:

1. Звіти по практичним: РН 2.1., 4.1. - 30 балів/10 балів.

2. Самостійна семестрова робота: РН 4.1, 3.1 - 30 балів/10 балів.

#### - підсумкове оцінювання у формі екзамену:

- Екзамен: (40 балів/0 балів, оцінює РН 1.1, 1.2).

- Максимальна кількість балів які можуть бути отримані здобувачем на екзамені - 40 балів;

- Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за екзамен не може бути меншою 24 балів;

- Здобувач не допускається до екзамену, якщо під час семестру набрав менше ніж 36 балів.

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	36	60
Підсумкове оцінювання	24	40
<b>Всього</b>	<b>60</b>	<b>100</b>

### 7.2 Організація оцінювання:

Протягом семестру здобувачі прослуховують лекції та виконують практичну та самостійну роботу, за результатами чого готують письмові та усні звіти., необхідні знання та навички для виконання якої отримують під час лекційних та консультаційних занять. Результатом виконання самостійної роботи є висновки у практичних та аналіз проблемних питань.

Для здобувачів, які упродовж курсу не досягли мінімального рубіжного рівня оцінки (36 балів), для одержання допуску до екзамену обов'язковим є виконання практичних та додаткових завдань.

### 7.3 Шкала відповідності оцінок

<b>Відмінно</b> / Excellent	90-100
<b>Добре</b> / Good	75-89
<b>Задовільно</b> / Satisfactory	60-74
<b>Незадовільно</b> / Fail	0-59
<b>Зараховано</b> / Passed	60-100
<b>Не зараховано</b> / Fail	0-59

**8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і семінарських / практичних / лабораторних (вибрати необхідне) занять**

№ п/п	Назва теми*	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
<i>Назва розділу чи частини I (якщо здійснюється поділ)</i>				
1	<b>Тема 1.</b> Об'єкти досліджень у молекулярній біофізиці. Особливості хімічного складу живої матерії. Міжмолекулярні взаємодії і сили, які стабілізують будову біологічних макромолекул. Методи вивчення міжмолекулярних взаємодій, емпіричні потенціали міжчастинкової взаємодії.	2	-	11
2	<b>Тема 2.</b> Основні фізичні властивості макромолекул. Біологічні макромолекули в розчині. Конформація макромолекул. Сили, які стабілізують просторову структуру макромолекул.	2	-	11
3	<b>Тема 3.</b> Макромолекулярна структура ДНК. Плавлення подвійної спіралі ДНК; зв'язок температури плавлення з нуклеотидним складом. Гіперхромний ефект. Денатурація ДНК як перехід спіраль - клубок. Природа кооперативності. Ентальпія і ентропія переходу. Макромолекулярна структура РНК та її біологічне значення.	2	-	11
4	<b>Тема 4.</b> Задачі, які вирішуються з допомогою обчислювальної біофізики. Інструменти, які використовує квантова біофізика. Моделювання молекулярних структур.	2	2	11
5	<b>Тема 5.</b> Методи моделювання молекулярних структур; квантово-хімічні методи; метод Хартрі-Фока; теорія збурень Моллера-Плессета (MP); теорія функціоналу густини (DFT).	2	-	11
6	<b>Тема 6.</b> Розрахунок енергії і оптимізація з аналітичними градієнтами для методів теорії збурення, зв'язаних кластерів, конфігураційної взаємодії, функціоналу густини, багато конфігураційного методу самоузгодженого поля.	2	-	11
7	<b>Тема 7.</b> Дослідження з допомогою пакету - Gaussian властивостей молекул та реакцій в газовій фазі та розчині, а саме - молекулярні енергії та структури; енергії та структури коливальних станів.	2		10
8	<b>Тема 8.</b> Мультипольні моменти; частоти коливань; термохімічні властивості; енергії зв'язків та реакцій; шляхи	2	-	10

	<i>протікання реакцій; молекулярні орбіталі; атомні заряди; електронні афінності та іонізаційні потенціали; поляризованості та гіперполяризованості; електростатичні потенціали та електронні густини.</i>			
9	<b>Тема 9.</b> Використання пакету <i>Gaussian</i> для визначення ІЧ та Раманівських спектрів; ЯМР зсувів; інтенсивності колового дихроїзму.	2	2	10
10	<b>ВСЬОГО</b>	18	4	96

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

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

Лекцій – **18 год.**

Практичні заняття - **4 год.**

Консультації – **2 год.**

Самостійна робота - **96 год.**

## 9. Рекомендовані джерела:

### Основна:

1. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. 4-те вид., доп. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. 872 с
2. Булавин Л.А. Структура мономеров ДНК: Монографія / Булавин Л.А., Говорун Д.Н., Николаенко Т.Ю. К.: Наукова думка, 2014. – 205 с. 978-966-00-1423-7
3. Сиволоб А.В. Фізика ДНК. –К.: ВПЦ «Київський університет», 2011
4. Сиволоб А.В. Молекула біологія. – К: Вища школа, 2008.
5. Давидовська Т.Л., Цимбалюк О.В., Войтешенко І.С., Грабчук Г.П. та ін. Фізика біосистем, КОМПРИНТ, 2016.
6. Биофизика / под. ред. П.Г. Костюка. - К.: Вища школа, 1988, - 504 с.
7. Richard Bader. Atoms in Molecules: A Quantum Theory. — USA: Oxford University Press, 1994. — ISBN 978-0-19-855865-1.

### Додаткова:

1. Гершензон С.М. Основы современной генетики. - Киев: Наукова думка, - 1983.
2. Божков А.И. Биотехнология. Фундаментальные и промышленные аспекты. - Учебное пособие для студентов высших учебных заведений. / Харьков.– 2005.– 364 с.
3. Dzyadevych S.V., Soldatkin A.P. Solid-state electrochemical enzyme biosensors / Київ: Академперіодика.– 2008.– 223с.