

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра нанофізики конденсованих середовищ

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Заступник директора
з науково-педагогічної роботи
Галина ПРАБЧУК
« 22 » 2021 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ОБЧИСЛЮВАЛЬНА БІОЛОГІЯ

для студентів

галузь знань 10 «Природничі науки»

спеціальність 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

освітній рівень Магістр

освітня програма «Високі технології (Прикладна фізика та наноматеріали)»

(назва освітньої програми)

вид дисципліни вибіркова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	3
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладачі: Войтешенко Іван Сергійович

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

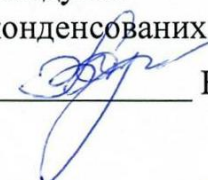
на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2021

Розробник(и): Войтешенко Іван Сергійович, к.ф.-м.н., асистент, кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри нанофізики
конденсованих середовищ


Валерій СКРИШЕВСЬКИЙ

Протокол № 7 від «25» 02 2021р.

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

Протокол від «05» 03 2021 року № 5

Голова науково-методичної комісії 
(Наталя РУСІНЧУК)

ВСТУП

1. Мета дисципліни – є ґрунтовне вивчення просторової будови, структурно-динамічних властивостей двох основних класів біополімерів та основних фізико-хімічних методів розрахункових досліджень їхніх властивостей, включаючи конформаційні переходи, та фізичні підґрунтя механізмів їхнього біологічного функціонування.

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

1. Знати основні поняття теорії квантової механіки та основи хімії, основні закономірності курсів оптики, електроніки, атомної та ядерної фізики.
2. Вміти застосовувати основні методи прикладної квантової механіки та хімії.
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 основних класів біополімерів сучасними розрахунковими методами.

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

4. Завдання (навчальні цілі):

Навчання дисципліни має на меті розвинути у студентів такі компетентності:

ЗК4. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК7. Здатність працювати в команді.

ЗК9. Здатність працювати автономно.

ЗК15. Здатність до прийняття рішень у складних і непередбачуваних умовах, що потребує застосування нових підходів та прогнозування.

ЗК16. Здатність генерувати нові ідеї.

ЗК17. Володіння спеціалізованими концептуальними знаннями, набутими у процесі навчання та/або професійної діяльності на рівні новітніх досягнень, які є основою для оригінального мислення та інноваційної діяльності, зокрема в контексті дослідницької роботи.

ЗК18. Здатність провадження дослідницької та інноваційної діяльності на відповідному рівні.

ФК2. Здатність оптимально визначити матеріальні засоби, необхідні для проведення наукового дослідження або науково-технічної розробки (матеріали, апаратура, обладнання, обчислювальна техніка та інше).

ФК3. Здатність аналізувати отримані результати, презентувати їх фахівцям у даній галузі, оформлювати наукові статті та науково-технічні звіти.

ФК7. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу, критичного осмислення проблем у професійній діяльності та на межі предметних галузей.

ФК10. Здатність відповідно до поставленої задачі проводити самостійно та в команді наукові дослідження фізичних систем, явищ і процесів (експериментальні, теоретичні, комп'ютерне моделювання) в галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання		Форми (та/або методи і технології)	Методи оцінювання та	Відсоток у підсумкові
Код	Результат навчання			

д		викладання і навчання	пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	й оцінці з дисципліни
1.1	Знати просторову будову, структурно-динамічні властивості двох основних класів біополімерів: нуклеїнових кислот та білків, а також фізико-хімічні розрахункові методи дослідження структурно-динамічних властивостей білків та нуклеїнових кислот. Ознайомлення зі спеціальним програмним забезпеченням для розрахунків або оцінювання необхідних параметрів біополімерів.	Лекції	Теоретичні запитання на заліку	40
2.1	Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для розрахунків або оцінювання необхідних параметрів біополімерів. Опису їхніх конформаційних змін та основ функціонування.	Лабораторні роботи	Звіти по лабораторних роботах Задача на заліку	30
4.1	Приймати та обґрунтувати рішення щодо вибору типу моделі, підходів моделювання та програмного комплексу для описання фізичних, біологічних чи хімічних процесів чи систем.	Лекції, лабораторні роботи, самостійна робота студента	Письмовий звіт з семестрової роботи	30

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни		
	1.1	2.1	4.1
ПРН4. Виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку наукової або науковотехнічної задачі, обирати методи та методики, складати програми наукових досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.	+	+	+
ПРН6. Встановлювати та аргументувати нові залежності між параметрами та характеристиками фізичних систем.	+	+	
ПРН 9 Визначати напрямки перспективних досліджень з урахуванням світових тенденцій розвитку науки, техніки й технологій	+		+
ПРН10. Складати описи виконаних досліджень і проектів, що розробляються, обробки, аналізу та інтерпретації результатів досліджень, підготовки даних для складання звітів і презентацій, написання доповідей, статей та іншої науковотехнічної документації.	+	+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

семестрове оцінювання:

1. Контрольна робота: РН 1.1 - 20 балів/10 балів.
2. Звіти по лабораторних роботах: РН 2.1. - 20 балів/10 балів.
3. Самостійна семестрова робота: РН 4.1 - 20 балів/10 балів.

- підсумкове оцінювання у формі диференційованого заліку:

- Письмовий залік: Тестові завдання 20 питань по 2 бали (40 балів/0 балів, оцінює РН 1.1).
- Максимальна кількість балів які можуть бути отримані студентом - 40 балів;
- Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за залік не може бути меншою 24 балів;
- Студент не допускається до заліку, якщо під час семестру набрав менше ніж 36 балів.
- Студент допускається до заліку за умови виконання всіх передбачених планом лабораторних робіт.
- Студент допускається до заліку за умови виконання самостійної семестрової роботи.

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	36	60
Підсумкове оцінювання	24	40
Всього	60	100

7.2 Організація оцінювання:

Протягом семестру студенти виконують лабораторні 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 лабораторних занять. Результатом виконання семестрового завдання є письмовий звіт.

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

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

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

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

Семінари – 0 год.

Практичні заняття - **0 год.**
Лабораторні заняття - **16 год.**
Тренінги – **0 год.**
Консультації – **0 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. V. Exploring chemistry with electronic structure methods. 2-nd edition / J. V. Foresman, Æ. Frisch. – Gaussian, Inc., Pittsburg, PA, 1996. – 302 p.
4. Соловьев М. М. Компьютерная химия / М. М. Соловьев, М. Е. Соловьев. – М. : Солон-пресс, 2005 . – 536 с.
5. Минкин В. И. Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – Ростов н/Д : Феникс, 1997. – 560 с.
6. Минкин В. И. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – М. : Химия, 1986. – 412 с.
7. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия / Н. Ф. Степанов. – М. : Мир, 2001. – 519 с.
8. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики /Д. И. Блохинцев. — М. Лань, 2004.

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. Васильев А.Н. Python на примерах. Практический курс по программированию. Издательство: "Наука и Техника", Санкт-Петербург, 2016 рік, 432 с.
9. Васильев А.Н. Самоучитель Matlab. Практический подход. Издательство: "Наука и Техника", Санкт-Петербург, 2012 рік, 448 с.