

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Інститут високих технологій

Кафедра нанofізики конденсованих середовищ



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора
з науково-педагогічної роботи

Галина ГРАБЧУК

«22» березня 2021 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ОБЧИСЛЮВАЛЬНА БІОЛОГІЯ

для студентів

галузь знань 10 «Природничі науки»

спеціальність 102 «Хімія»

освітній рівень Магістр

освітня програма «Високі технології (Хімія 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)

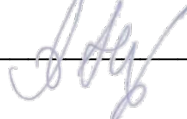
на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2021

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

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри нанофізики
конденсованих середовищ

 Олексій НИПОРКО

Протокол № 7 від «5» лютого 2021 р.

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

Протокол від «5» березня 2021 року № 3

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.
4. Знати основи оргінічної хімії та біохімії.

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 підвалин функціонування та конформаційних змін методами ab initio.

4. Завдання (навчальні цілі):

Навчання дисципліни має на меті розвивати у студентів такі компетентності:

ЗК2. Здатність вчитися та оволодівати сучасними знаннями.

ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК7. Здатність генерувати нові ідеї (креативність), а також формулювати судження, маючи неповну або обмежену інформацію.

ЗК12. Здатність працювати автономно, брати участь у командній роботі, здійснювати проектну діяльність під керівництвом.

ЗК14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

ФК2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.

ФК4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.

ФК5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

ФК9. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження.

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 просторову будову, структурно-	Лекції	Теоретичні	40

	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.		запитання на заліку	
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

Результати навчання дисципліни				
Програмні результати навчання	1.1	2.1	4.1	
ПР5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+	+	
ПР8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.	+	+		
ПР9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.	+	+	+	

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	практичні заняття	самостійна робота
<i>Назва розділу чи частини I (якщо здійснюється поділ)</i>				
1	Вступ. Тема 1 <i>Обчислювальна біологія як наука. Предмет і головні задачі обчислювальної біології. Програмні пакети, що дозволяють реалізовувати дослідження в області обчислювальної біології.</i> <i>Практичне заняття: «Знайомство з допоміжним програмним забезпеченням (пз) gaussview та chemcraft, формування завдань для розрахунків»</i>	2	2	8
2	Тема 2. <i>Міжмолекулярні взаємодії і сили, які стабілізують низькомолекулярні сполуки та основні класи біополімерів. Методи вивчення міжмолекулярних взаємодій. емпіричні потенціали міжчастинкової взаємодії.</i> <i>Практичне заняття: «Розрахунки енергії та оптимізація молекул отриманих в пр № 1»</i>	4	2	12
3	Тема 3. <i>Ab initio моделювання низькомолекулярних сполук та основних класів біополімерів. Методи квантово-хімічного моделювання. ППЕ та коливальний аналіз.</i> <i>Практичне заняття: «Розрахунки енергії дисоціації двохатомних молекул та енергії зв'язків багатоатомних молекул»</i>	4	2	12
4	Тема 4. <i>Базисні функції. Різновиди квантово-хімічних методів. Програмні реалізації квантово-хімічного моделювання.</i> <i>Практичне заняття: «Побудова молекулярних орбіталей молекул»</i>	2	2	12
5	Тема 5. <i>Перехідні стани, пошук та опис: дослідження за прикладі пакету - Gaussian властивостей молекул та реакцій в газовій фазі та розчині, шляхи протікання реакцій.</i> <i>Практичне заняття: «Сканування поверхні потенційної енергії»</i>	4	2	12
6	Тема 6. <i>Внутрішньомолекулярне та міжмолекулярне зв'язування. Теорія атомів у молекулах.</i> <i>Практичне заняття: «Розрахунок порядку зв'язків деяких вуглеводнів»</i>	4	2	12
7	Тема 7. <i>Дослідження збуджених станів, конфігураційних простір, ППЕ збуджених станів, дисоціація та молекулярні орбіталі.</i> <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. B. Exploring chemistry with electronic structure methods. 2-nd edition / J. B. Foresman, Æ. Frisch. – Gaussian, Inc., Pittsburg, PA, 1996. – 302 p.

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.