

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
Інститут високих технологій**

Кафедра молекулярної біотехнології і біоінформатики



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора з науково-педагогічної роботи
_Галина Грабчук

« 22 » березня 2021 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
Комп'ютерна структурна біологія**

для студентів

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	магістр
освітня програма вид дисципліни	Високі технології (Хімія та наноматеріали) вибіркова

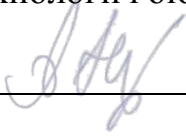
Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	3
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю іспит	

Викладачі: Нипорко О.Ю., канд.біол. наук, доцент, зав. кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

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

Розробник(и): Нипорко О.Ю., канд.біол. наук, доцент, зав. кафедри молекулярної біотехнології і біоінформатики

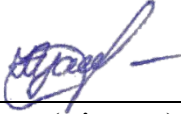
ЗАТВЕДЖЕНО
Зав. кафедри
молекулярної біотехнології і біоінформатики



Нипорко О.Ю.
Протокол № 7 від
5 «лютого» 2021 р.

Схвалено науково-методичною комісією
Інституту високих технологій

Протокол від « 5 » березня 2021 року № 3

Голова науково-методичної комісії 

Наталя Русінчук
(підпис)

1. Мета дисципліни – навчити студентів, що спеціалізуються в галузі прикладної фізики та наноматеріалів, орієнтуватися в сучасних концепціях структурної біології та біомолекулярного моделювання, дати детальні уявлення про просторову організацію та ієрархічність структури біологічних макромолекул, методи її відтворення та дослідження структурних змін в біологічних процесах, сформувати у студентів цілісний і системний й погляд на структурну організацію молекулярного рівня біологічних систем та застосування цих знань для вирішення задач створення нових наноматеріалів з заданими властивостями.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

Навчальна дисципліна «Комп’ютерна структурна біологія» базується на циклі дисциплін професійної та практичної підготовки бакалавра та магістра, а саме: “Молекулярна фізика”, «Квантова механіка», «Комп’ютерна практика», «Фізичні взаємодії в наносистемах», “Структурна біологія”.

3. Анотація навчальної дисципліни:

Дисципліна «Комп’ютерна структурна біологія» належить до переліку вибіркових дисциплін. 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 студентів такі компетентності:

1. загальних:

2. ЗК2. Здатність вчитися та оволодівати сучасними знаннями.
3. ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
4. ЗК14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел

5. спеціальних (фахових, предметних):

6. 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.
7. ФК7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).
8. ФК11. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати належні напрями та відповідні методи для їх розв’язання, беручи до уваги наявні ресурси.
9. ФК12. Розуміння етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (наукова доброчесність)

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	Знати:	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	лекція	==/	
1.7	Методи докінга низькомолекулярних сполук	лекція	==/	
1.8	Методи оцінки вільної енергії в процесі міжмолекулярних взаємодій	лекція	==/	
1.9	Принципи рецептор-орієнтованого дизайну/пошуку біологічно активних сполук	лекція	==/	
2	Вміти:	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	==/	==/	
3	Комунікація	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	
4	Автономність та відповідальність	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)	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	3.1	4.1
Програмні результати навчання (назва)								
P2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+	+	+	+			
P6. Знати методологію та організації наукового дослідження.	+	+	+	+	+			
P8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефхівців.					+	+	+	+
P13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.	+	+	+	+	+	+	+	+
P16. Використовувати інформаційно-комунікаційні технології для вирішення загальних професійних задач.					+	+	+	+
PP19. Оцінювати актуальність досліджуваних наукових проблем, придатність відомих наукових	+	+	+	+				+

методів для їх дослідження на основі аналізу наявних даних та публікацій у провідних виданнях.								
P17. Працювати з хімічними та біологічними базами даних.	+	+			+	+		+
P20. Знати основні принципи виведення на ринок нового фармацевтичного препарату.	+	+	+	+				

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання аспірантів: рівень досягнення всіх запланованих результатів навчання визначається за результатами написання письмових контрольних робіт, виконання практичних 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 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. Студенти, 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:

	ЗМ	
	<i>Min. – балів</i>	<i>Max. – балів</i>
Модульна контрольна робота	12	20
Виконання практичних робіт	15	25
Виконання студентами самостійних робіт	9	15

Орієнтований графік оцінювання:

	<i>Орієнтовний період для здійснення відповідної форми оцінювання</i>
Модульна контрольна робота 1	грудень
Виконання практичних робіт	вересень - листопад
Виконання самостійних робіт	вересень - листопад
Добір балів/додаткова контрольна робота та/або доскладання домашніх завдань	грудень
Іспит	грудень

Розрахунок балів, які аспірант отримує при успішній здачі заліку:

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

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень, % / Marks, %
Відмінно / Excellent	90-100%
Добре / Good	75-89%
Задовільно / Satisfactory	60-74%
Незадовільно / 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		6
2.	Кількісна оцінки просторових властивостей білків. Удосконалення моделей просторової структури. Комп'ютерне моделювання поведінки білків.	2	2	8
3.	Класифікація і еволюція білкових структур. Молекулярна графіка.	2		6
4.	Структурні особливості активних сайтів ферментів. Атомістичне відтворення реакцій та перехідних станів.	2	2	6
5.	Білок-білкові взаємодії та процеси білкової самозборки. Функціональні рухи в біомолекулах.	2		6
6.	Моделювання структури та функції іонних каналів. Особливості молекулярної динаміки білків та нуклеїнових кислот.	2	2	6
7.	Комп'ютерний дизайн білків. Структурне моделювання в імунології.	2		6
8.	Методи докінга низькомолекулярних сполук. Дослідження пертурбацій вільної енергії в білок-лігандних взаємодіях.	4	2	10
9.	Комп'ютерна фармакологія і токсикологія. Обчислювальні методи дослідження метаболізму ліків та ксенобіотиків. Пошук нових білків-мішеней в масштабі протеому.	2	2	6
ЗАГАЛОМ		20	10	60

Загальний обсяг **90** год., в тому числі:

Лекцій – **20** - год.

Семінари – **10** год.

Самостійна робота - **60** год.

9. Рекомендовані джерела:

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

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

12. 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.

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

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

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