

**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
спеціальність
освітній рівень
освітня програма
вид дисципліни

10 «Природничі науки»

105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

другий (магістр)

«Високі технології (прикладна фізика і наноматеріали)»

вибіркова

Форма навчання **денна**

Навчальний рік **2021/2022**

Семестр **3**

Кількість кредитів ECTS **3**

Мова викладання, навчання та оцінювання
українська

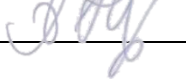
Форма заключного контролю **іспит**

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 

(підпис) Наталя Русінчук

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, сформулювати 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 вибіркового 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:

ЗК2. Здатність спілкуватися державною та іноземною мовами як усно, так і письмово.

ЗК5. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК6. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК7. Здатність працювати в команді.

ЗК8. Навички міжособистісної взаємодії.

ЗК10. Навички здійснення безпечної діяльності.

ЗК11. Здатність до подальшого навчання, яке значною мірою є автономним та самостійним.

ЗК13. Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми, що потребує оновлення та інтеграції знань, часто в умовах неповної/недостатньої інформації та суперечливих вимог.

ЗК14. Здатність зрозуміло і недвозначно доносити власні висновки, а також знання та пояснення, що їх обґрунтовують, до фахівців і нефахівців, зокрема до осіб, які навчаються.

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

ЗК19. Здатність нести відповідальність за розвиток професійного знання і практик, оцінку стратегічного розвитку команди.

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.

ФК8. Знання основних типів наноматеріалів, їх фізичних властивостей та процесів, що протікають нанорозмірних структурах, розуміння фізичних принципів роботи наноелектронних приладів та їх використання.

ФК11. Здатність забезпечувати впровадження результатів наукових досліджень шляхом створення нових матеріалів, пристроїв, технологій

та іншого

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	лекція	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	
1.2	Інструментальні підходи до визначення просторової структури біомакромолекул	лекція	=//=	
1.3	Методи реконструкції просторової структури макромолекул	лекція	=//=	
1.4	Критерії оцінки якості просторової структури білків	лекція	=//=	
1.5	Принципи розрахунків молекулярної динаміки макромолекулярних комплексів	лекція	=//=	
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	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1
	Програмні результати навчання (назва)														
ПРН1. Володіти поглибленим рівнем знань у прикладній фізиці, наноматеріалознавстві, високих технологіях та споріднених областях, включаючи методики проведення експериментів і технології отримання наноматеріалів, рівень цих знань повинен бути достатнім для проведення наукових досліджень на рівні останніх світових досягнень і направленим на їх розширення та поглиблення	+	+	+	+	+	+	+	+	+						
ПРН2 2. Використовувати знання в галузі прикладної фізики, математики, електроніки та інформаційних технологій для виконання наукових досліджень та розв'язання виробничих .	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+			
ПРН3. Знаходити та аналізувати наукову та науково-технічну інформацію в галузі прикладної фізики та наноматеріалів із вітчизняних та зарубіжних джерел, в тому числі з використанням сучасних пошукових систем	+	+	+	+	+	+	+	+	+						
ПРН4 Виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку наукової або науково-технічної 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.	+					+		+					+	+	+

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 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. 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:

	<i>ЗМ</i>	
	<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:

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. Коča, 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 Karabencheva-Christova, Christo Christov. Elsevier, 2018.