

**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

Структурна біологія та моделювання

для студентів

галузь знань

10 «Природничі науки»

спеціальність

102 «Хімія»

освітній рівень

другий (магістр)

освітня програма

«Високі технології (хемоінформатика)»

вид дисципліни

обов'язкова

Форма навчання

денна

Навчальний рік

2021/2022

Семестр

3

Кількість кредитів ECTS

3

Мова викладання, навчання та оцінювання

англійська

Форма заключного контролю **екзамен**

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

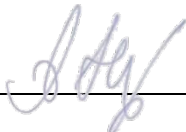
Пролонговано: на 20 /20 н.р.
на 20 /20 н.р.

() « » 20 р.
() « » 20 р.

Київ – 2021

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


ЗАТВЕДЖЕНО
Зав. кафедри 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-хіміків 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 хемоінформатики, біоорганічної та органічної хімії.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

Навчальна дисципліна «Структурна біологія та моделювання» базується на циклі дисциплін професійної та практичної підготовки бакалавра та магістра, а саме: «Молекулярна та клітинна біофізика», «Органічна хімія», «Біоінформатика», «Біохімія».

3. Анотація навчальної дисципліни:

Дисципліна «Структурна біологія та моделювання» належить до переліку обов'язкових 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:

ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності..

ЗК2. Здатність вчитись самостійно та брати на себе відповідальність за професійний розвиток.

ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу .

ЗК4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК5. Здатність до адаптації в нових ситуаціях.

ЗК 6 Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК 12 Здатність працювати автономно.

ФК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

ФК 8. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1, знати; 2, вміти; 3, комунікація; 4, автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи ітехнології) викладання 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	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			

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання: рівень досягнення всіх запланованих результатів навчання визначається за результатами написання письмових контрольних 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:

- **семестрове оцінювання:** контроль здійснюється за таким принципом. Навчальний семестр має один змістовний модуль. Після завершення теми №б 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 сумарно не менше, ніж *критично-розрахунковий мінімум 36 балів* за семестр. Здобувачі освіти, 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 здобувача освіти 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>Мін. – балів</i>	<i>Мах. – балів</i>
Модульна контрольна робота	12	20
Виступ на семінарі	15	25
Виконання самостійних робіт	9	15

Орієнтований графік оцінювання:

	<i>Орієнтовний період для здійснення відповідної форми оцінювання</i>
Модульна контрольна робота 1	травень
Виступ на семінарі	травень
Виконання самостійних робіт	березень - червень
Добір балів/додаткова контрольна робота та/або доскладання домашніх завдань	червень
Іспит	червень

Розрахунок балів, які 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 оцінка 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 рухливі 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 методидослідження 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. 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.
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 TatyanaKarabencheva-Christova, Christo Christov. Elsevier, 2018.

Контрольні запитання до курсу:

1. Техніки гомологічного порівняльного моделювання.
2. Оцінка якості моделей білків. Структура та компоненти оціночних функцій.
3. Передбачення структури білків методом протягування, методом конформаційного пошуку та за допомогою машинного навчання.
4. Поверхня потенційної енергії.
5. Наближення Борна-Опенгеймера.
6. Молекулярна і квантова механіка.
7. Потенціали, що застосовуються в молекулярно-механічних розрахунках.
8. Основні квантово-механічні методи.
9. Теорія перехідних станів. Методи пошуку сідлових точок.
10. Білкові домени. Методи визначення доменної архітектури білків.
11. Функціональні рухи в біомолекулах. Координовані рухи в білках. Доменна рухливість
12. Білок-білкові взаємодії та асоціативні процеси. Комплексоутворення, асоціація, агрегація.
13. Специфічні взаємодії «білок-ліганд». Основні характеристики.
14. Методи докінга низькомолекулярних сполук.
15. Програмні засоби ригідного та гнучкого докінгу.
16. Методи оцінки вільної енергії в білок-лігандних взаємодіях.
17. Молекулярна динаміка. Методи та застосування.