

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
Факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем
Кафедра медичної радіофізики

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана з навчальної роботи

_____ Олексій НЕЧИПОРУК

« ____ » _____ 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Фізика біомолекул

для студентів

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	105 Прикладна фізика та наноматеріали
рівень вищої освіти	другий
освітня програма	Біомедична фізика, інженерія та інформатика
вид дисципліни	вибіркова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	3
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладачі:

Судаков Олександр Олександрович, доцент, кандидат фіз.-мат. наук, доцент кафедри медичної радіофізики

Висоцький Володимир Іванович, професор, доктор фіз.-мат. наук, завідувач кафедри математики та теоретичної радіофізики

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

на 20__/20__ н. р. _____ (_____) « ____ » _____ 20__ р.

Розробники:

Судаков Олександр Олександрович, доцент, кандидат фіз.-мат. наук, доцент кафедри медичної радіофізики

Висоцький Володимир Іванович, професор, доктор фіз.-мат. наук, завідувач кафедри математики та теоретичної радіофізики

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри медичної радіофізики

_____ Сергій РАДЧЕНКО

Протокол № __ від « __ » _____ 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією факультету радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем

Протокол № __ від « __ » _____ 2022 р.

Голова науково-методичної комісії

Сергій РАДЧЕНКО

« __ » _____ 2022 року.

ВСТУП

1. Мета дисципліни "Фізика біомолекул" полягає в опануванні студентами основ застосування сучасних комп'ютерних технологій у моделюванні біологічних молекул

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

Навчальна дисципліна "Фізика біомолекул" є складовою циклу професійної підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня "магістр" і спирається на знання, отримані в курсах з квантової механіки, електродинаміки, статистичної фізики, молекулярної фізики, алгоритмів та методів обчислень, математичних та фізичних дисциплін дисциплін.

Попередні вимоги:

студент повинен знати: основи молекулярної фізики, квантової механіки, електродинаміки, статистичної фізики та математичних дисциплін у обсязі програм бакалаврату з прикладної фізики

студент повинен вміти: вирішувати задачі з квантової механіки, електродинаміки та молекулярної фізики і застосовувати відповідних математичних апарат

3. Анотація навчальної дисципліни:

Надаються основи квантово-механічних, напівкласичних та класичних методів моделювання електронної структури та геометрії складних молекул та великих систем простих молекул типу молекули води, застосування цих методів для задач моделювання складних біологічних молекул.

4. Завдання навчальної дисципліни (навчальні цілі):

1. Студент повинен знати структуру, призначення та базові механізми взаємодії біомолекул, а також основи комп'ютерного моделювання складних молекул та ансамблів простих молекул типу молекули води;

2 Студент повинен навчитись застосовувати методи комп'ютерного моделювання складних біологічних молекул та ансамблів простих молекул типу молекули води.

Дисципліна спрямована на формування програмних компетентностей:

– коди, назви компетентностей із переліку компетентностей в описі освітньої програми

ЗК 2 – Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності

ЗК 11 – Здатність працювати автономно

ФК 3 – Здатність брати участь у проведенні експериментальних досліджень властивостей фізичної системи, фізичних явищ і процесів

ФК 7 – Здатність до постійного поглиблення знань в галузі прикладної фізики, інженерії та комп'ютерних технологій

ПРН 1 – Показувати знання в галузі сучасної прикладної фізики та математики

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	Модульний контроль	до 36
1.1	Основи ab-initio методів молекулярного моделювання	<i>Лекція 1-3</i>	Модульний контроль	3
1.2	Основні квантово-хімічні задачі	<i>Лекція 4</i>	Модульний контроль	3
1.3	Врахування кореляції електронних хвильових функцій	<i>Лекція 5</i>	Модульний контроль	3
1.4	Розрахунок фізичних, хімічних та інших характеристик речовини на молекулярному рівні	<i>Лекція 6-7</i>	Модульний контроль	3
1.5	Методи силових полів	<i>Лекція 8</i>	Модульний контроль	3
1.6	Молекулярна динаміка	<i>Лекція 9</i>	Модульний контроль	3
1.7	Фізико-хімічні та біофізичні властивості однорідної та структурованої води, а також структурні та електроінамічні особливості кватратної моделі води Л.Полінга	<i>Лекції 10-11</i>	Модульний контроль	3
1.8	Особливості впливу води на дистанційну та пряму взаємодію атомів, йонів та біомолекул, а також на процеси ділення клітин і реплікацію ДНК	<i>Лекції 12-13</i>	Модульний контроль	3
1.9.	Методи генної інженерії та принципи і системи контрольованого зовнішнього впливу на мутацію ДНК	<i>Лекція 14</i>	Модульний контроль	3
1.10	Фактори та методи впливу водного середовища на ефективність дії селективних біомембран	<i>Лекція 15</i>	Модульний контроль	3
2	вміти:	лекційні заняття	Модульний контроль	до 14
2.1	Розв'язувати базові задачі взаємодії атомів, йонів і біомолекул в водному середовищі і вирішувати задачі молекулярного моделювання	<i>Лекції</i>	Модульний контроль	14
3	комунікація:	лекційні заняття	Модульний контроль	до 5
3.1	Здатність грамотно будувати наукову комунікацію як в усній так і письмовій формах, підбирати правильну термінологію	<i>Лекції,</i>	Модульний контроль	3
3.2	Здатність до командної роботи у великих науково-дослідницьких проектах	<i>Лекції,</i>	Модульний контроль	2
4	автономність та відповідальність:	лекційні заняття	Модульний контроль	до 5
4.1	Здатність до самостійного пошуку наукової літератури або інших джерел інформації для розв'язання поставленої перед студентом науково-дослідницької задачі	<i>Лекції,</i>	Модульний контроль	5

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	1.10	2.1	3.1	3.2	4.1
Програмні результати навчання (назва)														
ЗК 2 - Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
ЗК 11 – Здатність працювати автономно												+	+	+
ФК 3 – Здатність брати участь у проведенні експериментальних досліджень властивостей фізичної системи, фізичних явищ і процесів												+	+	+
ФК 7 – Здатність до постійного поглиблення знань в галузі прикладної фізики, інженерії та комп’ютерних технологій									+	+	+			
ПРН 1 – Показувати знання в галузі сучасної прикладної фізики та математики	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання

Рівень досягнення всіх запланованих результатів навчання визначається за результатами виконання індивідуальних завдань. Внесок результатів навчання у підсумкову оцінку, за умови їх опанування на належному рівні:

- результати навчання 1.1 – 1.6 [знання] – до 36;
- результат навчання 2.1 [вміння] – до 14;
- результат навчання 3.1-3.2 [комунікація] – до 5%;
- результат навчання 4.1 [автономність та відповідальність] – до 5%;

Форми оцінювання:

- **семестрове оцінювання:** Навчальний семестр має два змістовні модулі. Після кожного модуля проводяться письмові модульні контрольні роботи. Обов'язковим для допуску до іспиту є написання модульної контрольної не нижче, ніж 20 балів
- **підсумкове оцінювання (у формі іспиту):** форма іспиту – письмова з 3 питань, питання оцінюються до 14 балів. Всього за іспит можна отримати від 0 до 40 балів. Умовою досягнення позитивної оцінки за дисципліну є отримання не менш ніж 60 балів.
- **умови допуску до іспиту:** умовою допуску до іспиту є отримання студентом сумарно не менше, ніж *критично-розрахунковий мінімум* за семестр. Студенти, які протягом семестру сумарно набрали меншу кількість балів, ніж критично-розрахунковий мінімум **40 балів**, для одержання допуску до іспиту обов'язково повинні виконати необхідну кількість індивідуальних завдань.

У випадку відсутності студента 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:

Семестрова робота	Кількість балів	
	Min.	Max.
Модульний контроль 1	17	30
Модульна контроль 2	18	30

Орієнтований графік оцінювання:

Форма оцінювання	Орієнтовний період для здійснення відповідної форми оцінювання
Модульний контроль 1	жовтень
Модульна контроль 2	грудень
Добір балів/додаткові завдання	грудень
Іспит	грудень

Розрахунок балів, які отримують при успішній здачі іспиту:

Значення	Змістовні модулі	Залік	Підсумкова оцінка
Мінімум	40	20	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	Кількість годин	
		Лекції	Самостійна робота
1	Вступ, задачі курсу, основи ab-initio методів молекулярного моделювання	6	6
2	Основні квантово-хімічні задачі	2	2
3	Врахування кореляції електронних хвильових функцій	4	4
4	Розрахунок фізичних, хімічних та інших характеристик на молекулярному рівні	2	2
5	Методи силових полів	2	2
6	Молекулярна динаміка	2	2
7	Фізико-хімічні, структурні та електродинамічні властивості води. Структура та характеристики клатратних гідратів в об'ємі води. Методи використання клатратних гідратів для внутрішнього транспортування в біосистемах окремих молекул та комплексів	4	4
	Особливості впливу води на дистанційну та пряму взаємодію атомів, йонів та біомолекул, а також на процеси ділення клітин і реплікацію ДНК	4	4
	Методи генної інженерії та принципи і системи контрольованого зовнішнього впливу на мутацію ДНК	2	2
	Фізичний механізм та методи впливу водного середовища на ефективність дії селективних біомембран при транспортуванні різних йонів	2	2
Всього		30	30

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

Лекції **30** год.

Самостійна робота **60** год.

9. Рекомендована література:

Основні джерела:

1. A. Szabo, N. S. Ostlund Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Dover Publications, 1996, 465 pp.
2. K. Burk. The ABC of DFT. <http://dft.rutgers.edu/kieron/beta> cit. 01.05.2008
3. H. Bruus, K. Flensberg Many-body Quantum Theory In Condensed Matter Physics. - Oxford Univ Pr. – 2004, 435 pp.
4. В.І.Висоцький: Квантова механіка та її використання в прикладній фізиці. Підручник.- Видавництво Київського національного університету ім.Т.Г.Шевченка, Київ - 2008, 366 с.
5. V.I.Vysotskii, I.V.Smirnov, A.A.Kornilova. Introduction to the Biophysics of Activated Water - Universal Publishers, Roca Raton, Florida, USA - 2005, 160 p.

6. V.I.Vysotskii, A.A.Kornilova, I.V.Smirnov. Applied biophysics of activated water (the physical properties, biological effects and medical applications of MRET activated water) - World Scientific Publishing - 2009, 317 p.

Додаткові і джерела:

1. GROMACS manual <ftp://ftp.gromacs.org/pub/manual/manual-3.3.pdf> cit. 01.05.2022
2. Кононов М.В., Радченко С.П., Судаков О.О., Мисник А.В. Моделювання фізичних процесів: Методичні вказівки до проведення практичних занять Київ, ВПЦ “Київський університет”, 2006, 91 pp.