

«УТВЕРЖДАЮ»  
Декан биологического факультета МГУ



### Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Код и наименование дисциплины (модуля): “Динамика биополимеров” (часть 1 и часть 2)
2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.
3. Направление подготовки – **06.06.01 Биологические науки**. Направленность (профиль) программы Биофизика.
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП (осенние семестры аспирантов 1 (часть 1) и 2 (часть 2) годов обучения), спецкурс по выбору (читается на кафедре биоинженерии)
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотношенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

| Формируемые компетенции<br>(код компетенции)                                                                                                                                                            | Планируемые результаты обучения по дисциплине<br>(модулю)                                                                                                                                                                                                  |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| УК-1: Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях | Владеть:<br>навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях<br>Код В1 (УК-1)<br>Владеть:<br>навыками критического анализа и оценки современных научных |

|                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| <b>УК-2</b><br>Способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки.   | достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях<br><b>Код В2 (УК-1)</b><br><b>Знать:</b><br>методы научно-исследовательской деятельности<br><b>Код 31 (УК-2)</b>                                                            |
| <b>УК-3:</b><br>Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач                                                                             | <b>Владеть:</b><br>технологиями оценки результатов коллективной деятельности по решению научных и научно-образовательных задач, в том числе ведущихся на иностранном языке<br><b>Код В2 (УК-3)</b>                                                                                                            |
| <b>УК-4:</b><br>Готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языке                                                                                                    | <b>Владеть:</b><br>навыками анализа научных текстов на государственном и иностранном языках<br><b>Код В1 (УК-4)</b><br><b>Знать:</b><br>стилистические особенности представления результатов научной деятельности в устной и письменной форме на государственном и иностранном языках<br><b>Код 32 (УК-4)</b> |
| <b>ОПК-1</b><br>Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий | <b>Уметь:</b><br>собирать, отбирать и использовать необходимые данные и эффективно применять количественные методы их анализа                                                                                                                                                                                 |

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) приведены в Приложении.

6. Объем дисциплины (модуля) составляет 6 зачетных единицы, всего 216 академических часов, из которых 64 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (56 часов занятий лекционного типа, 8 часов семинарских занятий ) и 152 часа составляет самостоятельная работа аспиранта (изучение научной литературы, написание рефератов, подготовка устных докладов по темам рефератов).
7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия:  
ЗНАТЬ: физическую химию, биохимию, основы молекулярной биологии, основы физики белка, основы механики и квантовой механики (на уровне программ специалиста/магистра), теоретические и методологические основы биологических научных исследований.  
УМЕТЬ: вырабатывать на основе рационального анализа экспериментальных результатов свою точку зрения в вопросах выбора и применения современных методов оптической микроскопии для решения биологических задач и отстаивать ее во время дискуссии со специалистами и неспециалистами; читать и реферировать научную литературу, где в исследованиях применяются современные методы ВЛД/ДЕТЬ: современными информационно-коммуникационными технологиями, иностранным языком.
8. Образовательные технологии: классические лекционные технологии.
9. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий



# ЧАСТЬ I

| Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)                                                                                                                                                                                      | Всего (часы) | В том числе                                                         |                           |                        |                             |                                                                                                                     |                                           |                             |                             |       |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|---------------------------------------------------------------------|---------------------------|------------------------|-----------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-------|
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |              | Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы |                           |                        |                             |                                                                                                                     | Самостоятельная работа обучающегося, часы |                             |                             |       |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |              | Занятия лекционного типа                                            | Занятия семинарского типа | Групповые консультации | Индивидуальные консультации | Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, практические контрольные занятия и др)* | Всего                                     | Выполнение домашних заданий | Подготовка рефератов и т.п. | Всего |
| ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ ДИНАМИКИ БИОПОЛИМЕРОВ<br><br>Экспериментальные методы изучения динамики биополимеров. Простейшие динамические модели. Динамика конформационных степеней свободы. Влияние вязкости среды на конформационную подвижность. Иерархия амплитуд и времен конформационной релаксации. Проблема фолдинга. | 88           |                                                                     |                           |                        |                             | 2                                                                                                                   | 22                                        | 30                          | 36                          | 66    |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 20           | 8                                                                   |                           |                        |                             | 2                                                                                                                   | 10                                        | 4                           | 6                           | 10    |
| ДИНАМИКА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СТРУКТУР                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 20           |                                                                     |                           |                        |                             |                                                                                                                     |                                           |                             |                             |       |



|                                                                                                                                                                                                                           |     |    |  |  |  |   |  |    |    |    |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|----|--|--|--|---|--|----|----|----|----|
| энергии. Механическое описание систем со связями. Преобразования переменных. Вариационный принцип для мощности диссипации энергии и динамики конформационных движений.                                                    |     |    |  |  |  |   |  |    |    |    |    |
| <b>САМООРГАНИЗАЦИЯ<br/>ПОЛИМЕРНЫХ И<br/>БИОПОЛИМЕРНЫХ СТРУКТУР</b><br>Кинетика и термодинамика фолдинга.<br>Молекулярная динамика процессов<br>фолдинга. Структурно-динамические<br>эксперименты с единичными молекулами. | 20  | 8  |  |  |  | 2 |  | 10 | 4  | 6  | 10 |
| Промежуточная аттестация - зачет                                                                                                                                                                                          |     |    |  |  |  |   |  |    |    |    |    |
| Итого:                                                                                                                                                                                                                    | 108 | 28 |  |  |  | 4 |  | 32 | 34 | 42 | 76 |

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы аспирантов.  
Конспекты лекций, аудио- и видеозаписи лекций, файлы презентаций лекций, основная и дополнительная учебная литература (см. п.11)

11. Ресурсное обеспечение:  
Основная литература

1. Рубин А.Б. Биофизика. т.1. М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2013.- 472с.
2. Рапапорт Д.К. Искусство молекулярной динамики. М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2012.- 632с
3. Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. // Физика белка. М.: 2002.-376с.
4. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. // Статистическая физика макромолекул. М.: Наука, 1989. - 344с.
5. Волькенштейн М.В. // Конфигурационная статистика полимерных цепей. М.-Л.: Изд. АН СССР 1959. – 466с.



#### Дополнительная литература

1. Багабаев Н.К., Шайтан К.В. Алгоритмы и методы молекулярной динамики: учебно методический комплекс для бакалавров. *НОУДПО «Институт АйТи» Москва*, 2011. ISBN 978-5-98453-004-0, 134 с.
2. Ефремов Р.Г., Шайтан К.В. Молекулярное моделирование нано- и биоструктур. Учебно-методический комплекс для магистров *НОУДПО «Институт АйТи Москва*, 2011. ISBN 978-5-98453-039-2, 129 с.
6. Шайтан К.В. // Биофизика. 1994. Т. 9. С. 949.
7. Neveu E.R., West R.V., Eaton W.A. // PNAS. 2013. V.110. №44. P.17880.
8. Frenkel D., Smit B. // Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications. N.-Y.: Academic Press 2002, - 638p
9. Климонтович Ю.Л. // Статистическая физика. М.: Наука, 1982. – 606с.
10. Wolynes P.G. // Phil. Trans. R. Soc. 2005. V.363. P.453.

#### Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. Сайт группы молекулярного моделирования Биологического факультета МГУ - <http://www.molsim.org>
2. Статьи в открытом доступе - <http://istina.msu.ru/profile/ShaitanKV>

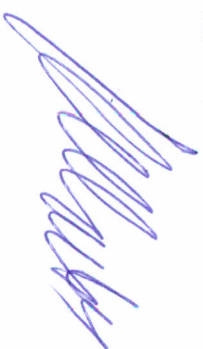
Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):

○ Интернет-браузер, базы данных PubMed (NCBI, <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed>)

Описание материально-технической базы.  
Кафедра биоинженерии биологического факультета МГУ располагает необходимым аудиторным фондом, компьютерами, проекторами и экранами, аудиопаратурой.

12. Язык преподавания: русский

13. Преподаватель (преподаватели): профессор кафедры биоинженерии К.В.Шайтан



Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) "Динамика биополимеров"

на основе карт компетенций выпускников

| РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ<br>по дисциплине (модулю)                                                                                                                                                                                     | КРИТЕРИИ И ПОКАЗАТЕЛИ<br>ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА<br>ОБУЧЕНИЯ<br>по дисциплине (модулю), баллы БРС |           |            |            |             | ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА                                  |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|------------|------------|-------------|-----------------------------------------------------|
|                                                                                                                                                                                                                                  | 1,<br>0                                                                                         | 2<br>1-29 | 3<br>30-59 | 4<br>60-89 | 5<br>90-100 |                                                     |
| <b>Владеть:</b><br>навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях<br>Код В1 (УК-1)                                          |                                                                                                 |           |            |            |             | - индивидуальное собеседование, реферат,<br>зачет   |
| <b>Владеть:</b><br>навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях<br>Код В2 (УК-1) | 0                                                                                               | 1-29      | 30-59      | 60-89      | 90-100      | - - индивидуальное собеседование, реферат,<br>зачет |
| <b>Знать:</b><br>методы научно-исследовательской деятельности<br>Код З1(УК-2)                                                                                                                                                    | 0                                                                                               | 1-29      | 30-59      | 60-89      | 90-100      | - индивидуальное собеседование, реферат,<br>зачет   |



|                                                                                                                                                                                                     |   |      |       |       |        |                                                   |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|------|-------|-------|--------|---------------------------------------------------|
| <b>Владеть:</b><br>технологиями оценки результатов<br>коллективной деятельности по решению<br>научных и научно-образовательных задач, в<br>том числе ведущейся на иностранном языке<br>Код В2(УК-3) | 0 | 1-29 | 30-59 | 60-89 | 90-100 | - индивидуальное собеседование, реферат,<br>зачет |
| <b>Знать:</b><br>стилистические особенности представления<br>результатов научной деятельности в устной<br>и письменной форме на государственном и<br>иностранном языках<br>Код З2(УК-4)             | 0 | 1-29 | 30-59 | 60-89 | 90-100 | - индивидуальное собеседование, реферат,<br>зачет |
| <b>Владеть:</b><br>навыками анализа научных текстов на<br>государственном и иностранном языках<br>Код В1(УК-4)                                                                                      | 0 | 1-29 | 30-59 | 60-89 | 90-100 | - индивидуальное собеседование, реферат,<br>зачет |
| <b>Уметь:</b><br>собирать, отбирать и использовать<br>необходимые данные и эффективно<br>применять количественные методы их<br>анализа                                                              | 0 | 1-29 | 30-59 | 60-89 | 90-100 | - индивидуальное собеседование, реферат,<br>зачет |

## Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Примеры вопросов к промежуточному контролю (темы рефератов, вопросы для индивидуального собеседования):

### Часть 1

1. Типы степеней свободы в макромолекулах.
2. Принципы описания конформационных движений.
3. Уравнения Ланжевена и описание динамики тепловых флуктуаций.
4. Иерархия времен релаксации в биополимерах.
5. Электронно-колебательные и электронно-конформационные взаимодействия.
6. Теория диффузии лигандов в белках.
7. Теория влияния вязкости на конформационную подвижность.
8. Теория динамики многоцентровых процессов.
9. Теоретические представления о фолдинге биополимеров.
10. Теория переноса электрона в белках.

### Часть 2

11. Основные принципы статистической теории перехода клубок-глобула.
12. Модель Рауза для динамики полимерной цепи.
13. Флуктуационно-диссипативная теорема.
14. Принцип минимума скорости диссипации энергии.
15. Реакции связей в полимерной цепи.
16. Вариационные принципы для конформационных движений в вязкой среде.
17. Динамика процессов фолдинга.

18. Модели энергетической воронки.
19. Кинетика изотермического и адиабатического испарения водно-белковой капли. Нестационарная конформационная динамика.



**ПРОГРАММА**  
**зачета по спецкурсу “Динамика биополимеров”**

**ЧАСТЬ I**

**ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ ДИНАМИКИ БИОПОЛИМЕРОВ.**

История изучения динамики биополимеров. Связь между конформационной подвижностью и функциональной активностью. Перспективы методов изучения динамики биополимеров: суперкомпьютеры и рентгеновские лазеры. Изотопный обмен. ЭПР и ЯМР. Флуоресцентные и фосфоресцентные метки. Рентгено-динамический анализ. Эффект Мессбауэра. Эксперименты *in silico*. Представления о конформационных движениях. Модель броуновского осциллятора с сильным затуханием. Ограниченная диффузия. Кинематика конформационных реакций связей. Уравнения Ланжевена для конформационных движений. Корреляция конформационных движений между узлами цепи. Неравновесной термодинамики. Принцип минимума скорости диссипации энергии. Теория Крамера для скорости элементарного акта в вязкой среде. Дырочная теория диффузии в жидкостях. Свободный объем и его измерение. Отклонения от формулы Крамера для биополимеров. Дырочная теория влияния вязкости на конформационную подвижность. Спектр времен релаксации биополимеров. Движения и степени свободы с резко различными временами релаксации. Модель армированной капли. Парадокс Левинтала. Теория энергетической воронки. Вариационные принципы в теории фолдинга. Фолдинг модельных систем. Компьютерное моделирование фолдинга. Перспективы изучения динамики процессов фолдинга-анфолдинга.

**ДИНАМИКА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СТРУКТУР.**

Диффузия СО в миоглобине. Экспериментальные данные по скорости и зависимости от вязкости. Молекулярная динамика диффузии. Модель флуктуирующей щели. Транспорт ионов через канал. Типы каналов. Роль аминокислотного интерьера в обеспечении селективности канала. Энергия гидратации иона и энергия сольватации иона в канале. Примеры компьютерного моделирования транспорта ионов. История развития идей в области ферментативного катализа. Группы активного центра. Динамика связывания субстрата. Многоцентровые химические реакции. Модель многомерного потенциального ящика с активной зоной для оценки скорости многоцентрковой реакции. Сравнение с экспериментом. Реакции переноса электрона в химии и биологии. Низкотемпературные эффекты. Энергия активации переноса. Туннелирование электрона. Температурные зависимости скорости переноса электрона на примере первичных стадий фотосинтеза.

Электронно-колебательные и электронно-конформационные взаимодействия при переносе электрона. Структурное туннелирование. Молекулярное моделирование переноса электрона в белках.

## ЧАСТЬ 2 ДИНАМИКА ПОЛИМЕРНОЙ ЦЕПИ

История развития теории полимеров. Полимерный клубок и глобула. Хороший и плохой растворитель. Идеи скейлинга. Фазовые переходы в полимерных системах. Основные идеи статистического описания макромолекул. Энтальпия, энтропия и свободная энергия полимерной цепи. Теплоемкость полимерной цепи. Влияние растворителя на состояние и энергетику полимерной цепи. Описание динамики полимерной цепи в растворе. Уравнения Ланжевена. Спектр времен релаксации. Стохастическая теория динамики сплошной среды. Уравнения Ланжевена и Фоккера-Планда. Белый шум и цветной шум. Обобщенное уравнение Ланжевена. Флуктуационно-диссипативная теорема. Теория Онзагера для кинетики процессов в слабо неравновесных средах. Соотношения Онзагера. Принцип минимума скорости диссипации энергии и принцип максимума диссипации энергии. Механика систем со связями. Голономные и неголономные системы. Реакции связей. Примеры голономных систем. Динамика полимерной цепи с фиксированными длинами связей и валентных углов. Конфигурации на многомерной торе. Применение представлений о минимуме скорости диссипации энергии к конформационным движениям полимерной цепи в вязкой среде. Соотношения для суммы моментов сил трения и суммы сил трения в случае однородной и неоднородной цепи (среды).

## САМООРГАНИЗАЦИЯ ПОЛИМЕРНЫХ И БИПОЛИМЕРНЫХ СТРУКТУР

Экспериментальные данные по кинетике и термодинамике процессов фолдинга белков. Сверхбыстрый фолдинг. Простые модели фолдинга. Модели энергетической воронки. Зависимость скорости фолдинга от длины цепи и вязкости среды. Молекулярная динамика процессов фолдинга. Работы группы Д.Шо по изучению динамики фолдинга. Энергетика фолдинга по данным молекулярного моделирования. Перспективы развития теории предсказания пространственной структуры белков. Развитие современных методов изучения структуры и динамики биополимеров. Рентгеновские лазеры. Особенности экспериментов на рентгеновских лазерах. Доставка образцов в область пучка. Особенности экспериментов с единичными молекулами. Испарение водно-белковой капли и влияние этих эффектов на результаты экспериментов.