

«УТВЕРЖДАЮ»

Декан биологического факультета МГУ

Академик
М.П.Киричников
2015 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Код и наименование дисциплины (модуля): “Динамика биополимеров”

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.

3. Направление подготовки – 06.06.01 Биологические науки. Направленность (профиль) программы – биофизика, математическая биология и биоинформатика.

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП (осенний семестр), спецкурс по выбору (читается на кафедре биоинженерии)

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (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	<p><i>Владеть:</i></p> <p>навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</p> <p>Код В1 (УК-1)</p> <p><i>Владеть:</i></p>

		навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в Междисциплинарных областях Код В2 (УК-1)
УК-2	<i>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.</i>	Знать: методы научно-исследовательской деятельности Код 31 (УК-2)
УК-3:	<i>Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач</i>	Владеть: технологиями оценки результатов коллективной деятельности по решению научных и научно-образовательных задач, в том числе ведущейся на иностранном языке Код В2 (УК-3)
УК-4:	<i>Готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языке</i>	Владеть: навыками анализа научных текстов на государственном и иностранном языках Код В1 (УК-4) Знать: стилистические особенности представления результатов научной деятельности в устной и письменной форме на государственном и иностранном языках Код 32 (УК-4)
ОПК-1	<i>Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</i>	Уметь: 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 3 зачетных единицы, всего 108 академических часов, из которых 32 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (28 часов занятий лекционного типа, 4 часа семинарских занятий) и 76 часов составляет самостоятельная работа аспиранта (изучение научной литературы, написание реферата, подготовка устного доклада по теме реферата).

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 реферирировать научную литературу, где в исследованиях применяются современные методы оптической микроскопии, в том числе на иностранных языках, при условии соблюдения научной этики и авторских прав.

ВЛАДЕТЬ: 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

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы))	В том числе		Самостоятельная работа обучающегося, часы из них	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них		Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.
ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ ДИНАМИКИ БИОПОЛИМЕРОВ	20	2	22	30	36
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.					
ДИНАМИКА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СТРУКТУР	88	8	2	10	4
	20			6	10

Диффузия лигандов и транспорт ионов. Ферментативный катализ. Перенос электрона.							
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. Рашапорт Д.К. Искусство молекулярной динамики. М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2012.- 632с

Дополнительная литература

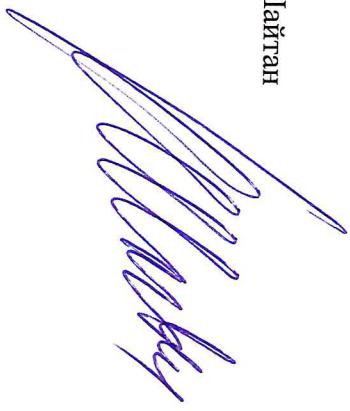
1. Барабаев Н.К., Шайтан К.В. Алгоритмы и методы молекулярной динамики: учебно методический комплекс для бакалавров. *НОУДПО «Институт АйТи» Москва*, 2011. ISBN 978-5-98453-004-0, 134 с.
2. Ефремов Р.Г., Шайтан К.В. Молекулярное моделированиеnano- и биоструктур. Учебно-методический комплекс для магистров *НОУДПО «Институт АйТи Москва*, 2011. ISBN 978-5-98453-039-2, 129 с.

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/ShaiRankV>

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, аудиоаппаратурой.
- 12. Язык преподавания: русский
- 13. Преподаватель (преподаватели): профессор кафедры биоинженерии К.В.Шайтан



Приложение

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

на основе карт компетенций выпускников

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

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

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

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

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.

ПРОГРАММА
зачета по спецкурсу “Динамика биополимеров”

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. ЭГР и ЯМР. Флуоресцентные и фосфоресцентные метки. Рентгено-динамический анализ. Эффект Мессбауэра. Эксперименты *in silico*. Представления о конформационных подсостояниях. Модель броуновского осциллятора с сильным затуханием. Ограниченнная диффузия. Кинематика конформационных движений. Пересчет векторов смещений узлов цепи в изменения двугранных углов. Силы невалентных взаимодействий между узлами цепи. Реакции связей. Уравнения Ланжевена для конформационных движений. Корреляция конформационных движений. Принципы 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 Левингтона. 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 флюктуирующей 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. Многолентевые химические реакции. Модель многомерного потенциального ящика с активной зоной для оценки скорости многолентевой 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.