

«УТВЕРЖДАЮ»
 Декан биологического факультета МГУ
 Академик **М.П.Кирпичников**
 « » 2015 г.



Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Код и наименование дисциплины (модуля): **“Теоретическая механика”**
2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.
3. Направление подготовки – **06.06.01 Биологические науки**. Направленность (профиль) программы – Математическая биология и биоинформатика.
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП (весенний 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)
<i>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</i>	Владеть: навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях Код В1 (УК-1) Владеть:

	<p>навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</p> <p>Код В2 (УК-1)</p>
<p>УК-2</p> <p><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></p>	<p>Знать:</p> <p>методы научно-исследовательской деятельности</p> <p>Код З1 (УК-2)</p>
<p>УК-3:</p> <p><i>Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач</i></p>	<p>Владеть:</p> <p>технологиями оценки результатов коллективной деятельности по решению научных и научно-образовательных задач, в том числе ведущейся на иностранном языке</p> <p>Код В2 (УК-3)</p>
<p>УК-4:</p> <p><i>Готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языке</i></p>	<p>Владеть:</p> <p>навыками анализа научных текстов на государственном и иностранном языках</p> <p>Код В1 (УК-4)</p> <p>Знать:</p> <p>стилистические особенности представления результатов научной деятельности в устной и письменной форме на государственном и иностранном языках</p> <p>Код З2 (УК-4)</p>
<p>ОПК-1</p> <p><i>Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</i></p>	<p>Уметь:</p> <p>собирать, отбирать и использовать необходимые данные и эффективно применять количественные методы их анализа</p>

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

6. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 академических часа, из которых 28 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (24 часов занятий лекционного типа, 4 часа семинарских занятий) и 44 часа 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, основы физики белка, общую физику и матанализ (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 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								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, коллоквиумы, практические контрольные занятия и др)*	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ МЕХАНИКИ Принцип наименьшего действия. Законы сохранения. Одномерное движение. Задача двух тел. Осциллятор. Классические степени свободы в молекулах и макромолекулах.	40	18				2	20	8	12	20
ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ ТЕРЕТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ В ХИМИИ И БИОЛОГИИ Основы молекулярной динамики. Динамика белков. Динамика функциональных структур.	32	6				2	8	12	12	24
Промежуточная аттестация - зачет										

Итого:	72	24				4	28	20	24	44
---------------	-----------	-----------	--	--	--	----------	-----------	-----------	-----------	-----------

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. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая механика. М.: Наука 1988.-216с.

2. Френкель Д., Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям. М.: Научный мир, 2013.-578с.

Дополнительная литература

1. Балабаев 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.

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. Сайт группы молекулярного моделирования Биологического факультета МГУ - <http://www.molsim.org>

2. Учебники в открытом доступе - <http://by-chgu.ru/tag/ландау>

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

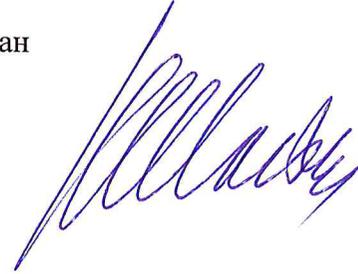
○ Интернет-браузер, базы данных PubMed (NCBI, <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed>)

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

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'K.V. Shaitan', is positioned to the right of the text for item 13.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) “Теоретическая механика”

на основе карт компетенций выпускников

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ и ПОКАЗАТЕЛИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю), баллы БРС					ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА
	1	2	3	4	5	
Владеть: навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях Код В1 (УК-1)	0	1-29	30-59	60-89	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 иностранном 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. Основные понятия механики. Состояние механической системы. Обобщенные координаты и скорости.
2. Функция Лагранжа. Принцип наименьшего действия. Основные понятия Вариационного исчисления.
3. Уравнения Лагранжа. Траектории. Единственность классической траектории.
4. Законы сохранения. Механическое подобие.
5. Одномерное движение.
6. Движение в центрально симметричном поле. Падение на центр.
7. Осциллятор с затуханием.
8. Задача Ландау-Теллера.
9. Осциллятор во внешнем поле.
10. Нормальные моды.
11. Конформационная динамика.
12. Молекулярная динамика биоструктур.

ПРОГРАММА

зачета по спецкурсу “Теоретическая механика”

ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ МЕХАНИКИ.

История развития механики. Понятие материальной точки. Состояние механической системы. Связь механики с другими разделами физики и естествознания. Современные достижения механики. Функция Лагранжа, действие и принцип Гамильтона. Обобщенные координаты.

Основные понятия вариационного исчисления. Уравнения Лагранжа. Кинетическая и потенциальная энергии. Траектории. Связь формализма Лагранжа с законами Ньютона. Короткий экскурс к фейнмановской формулировке квантовой механики (интегралам по траекториям). Следствия фундаментальных свойств симметрии пространства-времени. Законы сохранения энергии, полного импульса и полного момента импульса. Особенности применения законов сохранения при частичном нарушении симметрии пространства. Механическое подобие. Теорема вириала. Точное решение задачи об одномерном движении. Финитное и инфинитное движение. Период колебания частицы в потенциальной яме. Выделение движения центра масс и относительного движения. Центральное симметричное взаимодействие. Центробежная энергия. Плоский характер движения в центрально симметричном поле. Финитное и инфинитное движение в центрально симметричном поле. Прицельное расстояние. Падение частицы на центр. Классический атом. Гармонический осциллятор. Осциллятор с затуханием. Спектр колебаний. Режимы слабого и сильного затухания. Колебательная релаксация. Осциллятор под действием импульса внешней силы. Задача Ландау-Теллера. Адиабатические столкновения. Осциллятор с затуханием под действием периодической внешней силы. Средняя поглощаемая и средняя рассеиваемая мощности. Средняя запасенная энергия. Можно ли селективно накачать молекулярный осциллятор лазерным излучением? Критерии классической степени свободы. Колебания систем со многими степенями свободы. Нормальные моды. Фононы. Механический фильтр частот. Колебания при наличии дефектов, локализация колебаний. Модели Дебая и Эйнштейна для колебаний в кристаллических решетках. Внутренние степени свободы в макромолекулах. Конформационные степени свободы. Описание конформационных движений. Влияние вязкости среды на конформационные движения.

ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ В ХИМИИ И БИОЛОГИИ

История развития молекулярной динамики. Вклад отечественных ученых в развитие метода. Основные алгоритмы решения уравнений движения. Силовые поля. Термостат и баростат. Граничные условия. Методы учета кулоновских сил. Протоколы моделирования. Достижения современной молекулярной динамики. История развития проблемы конформационной динамики белков. Экспериментальные методы изучения. Рентгено-динамический анализ и эффект Мессбауэра. Компьютерное моделирование динамики белка. Молекулярная динамика белков, их комплексов с другими белками и лигандами, биомембран. Динамика транспорта ионов через каналы. Динамика трансмембранного транспорта небольших молекул. Динамика взаимодействия пептидов с наноструктурами и наноструктур с биомембранами.