

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**Физико-химические методы исследования биомолекул и компьютерное
моделирование биоструктур**

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Фундаментальная и прикладная энзимология

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Физико-химические методы исследования биомолекул и компьютерное моделирование биоструктур**

2. Уровень высшего образования – **специалитет.**

3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

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

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-1.С. Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	Знать: актуальные направления исследований в области современной нанобиотехнологии биомолекул
СПК-4.С. Способность использовать основные физико-химические методы исследования биомолекул в практической деятельности	Знать: физико-химические основы методов исследования биомолекул и биоструктур Уметь: анализировать экспериментальные данные и предлагать комплекс физических методов для анализа биомолекул и биоструктур
СПК-3.С. Способность применять методы генетической инженерии и компьютерного моделирования биоструктур при решении профессиональных задач	Знать: теоретические основы компьютерного моделирования биоструктур Владеть: основами программного обеспечения для моделирования биоструктур

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачетные единицы, всего 144 часа, из которых 90 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (42 часа занятия лекционного типа, 42 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 54 часа составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: общие положения, законы и теории базовых химических и математических дисциплин, основы биохимии, основные классы биоорганических соединений.

Уметь: применять сведения в области физической химии к решению упрощенных задач

Владеть: навыками анализа физико-химических параметров системы для предсказания возможных протекающих процессов, методами анализа экспериментальных данных.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

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, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Тема 1. ИК-спектроскопия	17	7	7				14	3		3
Тема 2. Спектроскопия КД	17	7	7				14	3		3
Тема 3. Методы характеристики размеров нанобъектов в растворе	19	7	7			2	16	3		3
Тема 4. АСМ и СЗМ	17	7	7				14	3		3

Тема 5. Флуоресцентная микроскопия	17	7	7				14	3		3
Тема 6. Компьютерное моделирование нанобиоструктур	19	7	7			2	16	3		3
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>	38			2			2			36
Итого	144	42	42	2		4	90			54

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. **Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):** конспекты лекций, литература из рекомендованного списка

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Конспекты лекций

Дополнительная литература

1. Научные статьи и обзоры, предоставленные лекторами
2. А Леск Введение в биоинформатику. Пер. с англ. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. - 318 с.
3. Х.Д.Хельтёе, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс Молекулярное моделирование (теория и практика) М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010.- 318 с:
4. М.В. Волькенштейн Биофизика. Москва, «Наука», 1981, с.575.

5. С.Д. Варфоломеев Химическая Энзимология. Москва, «Академия», 2005, с. 472.
6. Кантор Ч., Шиммел П. Биофизическая химия. В 3х томах. «Мир», 1984 г, т.2.
7. Страйер Л. Биохимия. В 3х томах, «Мир», 1984 г.
8. Atlas of Protein Sequence and Structure, Suppl 3, 1978, M. O. Dayhoff, ed. National Biomedical Research Foundation, 1979.
9. Koonin E.V., Galperin M.Y. “Sequence - Evolution - Function Computational Approaches in Comparative Genomics”. Доступна по адресу <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21089240>
10. Geoffrey J. Barton Protein Sequence Alignment and Database Scanning. Доступна по адресу http://www.compbio.dundee.ac.uk/papers/rev93_1/rev93_1.html
11. «2Can Support Portal – Bioinformatics» . Справочное руководство по биоинформатике, подготовленное сотрудниками Европейского института биоинформатике. Доступно по адресу <http://www.ebi.ac.uk/2can/home.html>
12. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/BLAST/tutorial/Altschul-1.html>
13. Thompson J.D., Higgins D.G., Gibson T.J. CLUSTAL W: improving the sensitivity of progressive multiple sequence alignment through sequence weighting, position-specific gap penalties and weight matrix choice. *Nucleic Acids Res.* 1994 Nov 11; **22**(22):4673-80.
14. Schwede T., Kopp J., Guex N., and Peitsch M.C. SWISS-MODEL: an automated protein homology-modeling server. *Nucleic Acids Research*, 2003, **31**, 3381-3385.
15. Rachel Karchin. Hidden Markov Models and Protein Sequence Analysis. Доступно по адресу <http://www.cse.ucsc.edu/research/compbio/ismb99.handouts/KK185FP.html>
16. Eddy S. Серия статей в секции “Primer” журнала *Nature Biotechnology*, 2004, **22** (№ 7-10). Доступны по адресу http://www.liacs.nl/~hoogeboo/mcb/nature_primer.html
17. Baker D., Sali A. Protein Structure Prediction and Structural Genomics. *Science*, 2001, **294**, 93-96.
18. Schueler-Furman O., Wang C., Bradley Ph., Misura K., Backer D. Progress in modeling of protein structures and interactions. *Science*, 2005, **310**, 638-642.
19. Computer Simulation of Biomolecular Systems: Theoretical and experimental by Wilfred F. van Gunsteren, Paul K. Weiner, Tony Wilkinson - Science — 1997
20. Computational studies of RNA and DNA By Jiří Šponer, Filip Lankaš, Springer, 2006
21. GROMACS 4.0 manual.
22. DeLano, W.L. The PyMOL Molecular Graphics System (2002) on World Wide Web <http://www.pymol.org>
23. Vienna RNA Package, *Nucleic Acids Res.* 31: 3429-3431 (2003)
24. E. Vanquelef, G. Marquant, J. C. Delepine, P. Cieplak & F.-Y. Dupradeau. R.E.D. Server: a web service designed to derive RESP and ESP charges of high quality and reproducibility and to generate force field libraries for new molecules and new molecular fragments. Université de Picardie Jules Verne - Burnham Institute for Medical Research (2009).
25. Gregory R. Bowman, Xuhui Huang, Yuan Yao, Jian Sun, Gunnar Carlsson, Leonidas J. Guibas, and Vijay S. Pande, *J. Am. Chem. Soc.*, 130 (30), 9676–9678, 2008

- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели: доц. д.х.н. Кудряшова Е.В., м.н.с. Евтушенко Е.Г., в.н.с. к.ф.-м.н. Упоров И.В., проф. д.х.н. Савицкий А.П.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамен. На экзамене проверяется достижение результатов обучения, перечисленных в п.5.

Вопросы к экзамену:

- 1) Что такое эллиптичность? Какую информацию получают из анализа спектров КД в дальней УФ области? Ответ обоснуйте. Как осуществляется анализ КД спектров? Какие характеристические полосы в дальней КД области используют для анализа структуры белков?
- 2) Какой аналитический сигнал измеряется в ИК спектроскопии? Чем определяется частота валентных колебаний функциональных групп биомолекул? Какую информацию о структуре белка можно извлечь из анализа ИК спектров. Какую область в ИК спектре рассматривают для анализа структуры белков, как она называется и чему она соответствует?
- 3) ИК спектроскопия: что такое частота колебаний и что такое волновое число? Как они соотносятся между собой? Какова размерность этих двух величин? Почему несмотря на разнообразие аминокислот и функциональных групп в белках, ИК спектры белков не представляют собой «частокол» всевозможных пиков, а имеют только несколько характеристических полос поглощения. Чему они соответствуют? Как проявляются различия в ИК спектрах различных белков и в какой области?
- 4) Какую информацию несут спектры КД белков в области поглощения ароматических аминокислот? Ответ поясните.
- 5) Принципы конфокальной микроскопии и двухфотонной (многофотонной) микроскопии. Сходство и различие.
- 6) Детекция одиночных молекул, флуоресцентная корреляционная микроскопия. Принцип метода. Информация, которая может быть получена этим методом.
- 7) Переход микроскопия- наноскопия. Функция распределения точечного источника света, поинтиллизм. Методы PALM/STORM.
- 8) Пределы разрешения для различных методов субдифракционной микроскопии.
- 9) Теоретические основы метода DLS. Корреляционная кривая. Математические методы обработки получаемого сигнала. Ограничения метода
- 10) Теоретические основы метода NTA. Принципиальная схема прибора. Математические методы обработки получаемого сигнала. Ограничения метода

11) Гомологическое моделирование белковых структур – актуальность и примеры модельных белковых структур. Банки данных белковых структур и последовательностей PDB и UNIPROT и содержащейся в этих банках информация. Экспериментальные методы расшифровки белковых структур - рентгеноструктурный анализ, метод многомерного ядерного магнитного резонанса, низкотемпературная электронная микроскопия. Структурно-консервативные участки в структуре белков и методы их определения.

12) Математические методы построения выравниваний белковых последовательностей и алгоритмы поиска гомологов по базам данных белковых последовательностей на примере методов FASTA и BLAST. Стратегия и детали гомологического моделирования третичной структуры белков.

13) Вторичная и третичная структура нуклеиновых кислот. Методы моделирования третичной структуры нуклеиновых кислот. Расчет удаленных электростатических и Ван-Дер-Ваальсовых взаимодействий. Учёт поляризации растворителя (PME, reaction-field shift). Самосборка бислоя.

14) Загрубленное (Coarse grained) описание НК и применение к моделированию структур больших НК, как в свободном состоянии, так и в связанном с другими биополимерами.

15) Современные методы классификации последовательностей и пространственных структур белков (структурные и последовательные домены белков, базы данных PFAM, SCOP, CATH) и подходы к построению множественных выравниваний белковых последовательностей с использованием метода скрытых Марковских моделей.

16) Молекулярные машины – природные и искусственные. Использование молекулярных машин на основе биомоторов (F0F1-ATP synthase, kinesin, dynein, myosin, RNA polymerase) – связь функции и механики.

17) Структурная нанотехнология на основе молекул ДНК. Методы построения наноструктур из молекул ДНК (самосборка).

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности не принципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать: актуальные направления исследований в области современной нанобиотехнологии биомолекул</p> <p>Знать: физико-химические основы методов исследования биомолекул и биоструктур</p> <p>Знать: теоретические основы компьютерного моделирования биоструктур</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<p>Уметь: анализировать экспериментальные данные и предлагать комплекс физических методов для анализа биомолекул и биоструктур</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<p>Владеть: основами программного обеспечения для моделирования биоструктур</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>