

Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
(НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

**ПРОГРАММА КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА
ПО СПЕЦИАЛЬНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**
(физико-математические науки)

Направление подготовки: **03.06.01 Физика и астрономия**

Направленность: **03.01.02 Биофизика**

РАЗРАБОТАНА в соответствии с:

Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению 03.06.01 Физика и астрономия (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденным приказом Минобрнауки России от 30.07.2014 № 867

в Отделении молекулярной и радиационной биофизики (ОМРБ)
НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

РАЗРАБОТЧИКИ:

Орлов Ю.Н.,
д.ф.-м.н., 03.01.02 «Биофизика»

Петухов М.Г.,
д.ф.-м.н., 03.01.02 «Биофизика»

СОГЛАСОВАНО:

Заместитель директора
по научной работе



С.В. Саранцева

Начальник
управления образования



А.Ю. Черненко

РАССМОТРЕНА и ОДОБРЕНА

на заседании Ученого совета НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

протокол от 08 ФЕВ 2018 № 1

Секретарь Ученого совета
Ученый секретарь



С.И. Воробьев

Общие сведения

Программа кандидатского экзамена по специальной дисциплине по направлению подготовки 03.06.01 «Физика и астрономия» направленности 03.01.02 «Биофизика» (далее – Программа кандидатского экзамена) разработана на основе примерной программы кандидатского экзамена по специальности «Биофизика» по физико-математическим и техническим наукам, утвержденной приказом Министерства образования и науки РФ от 08.10.2007 № 274 «Об утверждении программ кандидатских экзаменов».

Программа кандидатского экзамена определяет цель, задачу, форму проведения и регламент кандидатского экзамена, шкалу и критерии оценивания результатов кандидатского экзамена, а также содержит перечень вопросов, выносимых на кандидатский экзамен (далее – Перечень вопросов), и рекомендации по подготовке к кандидатскому экзамену в виде перечня рекомендуемой литературы для подготовки к кандидатскому экзамену.

Кандидатский экзамен по специальной дисциплине является формой промежуточной аттестации по учебным дисциплинам вариативной части основной профессиональной образовательной программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ (далее – Институт) по направлению подготовки 03.06.01 «Физика и астрономия» направленности 03.01.02 «Биофизика» (далее – программа аспирантуры), направленным на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по специальной дисциплине (далее – кандидатский экзамен).

Для допуска к сдаче кандидатского экзамена обучающийся, осваивающий программу аспирантуры Института, должен пройти промежуточную аттестацию по учебным дисциплинам программы аспирантуры Института, направленным на подготовку к сдаче кандидатского экзамена, в формах, предусмотренных учебным планом программы аспирантуры.

При наличии государственной аккредитации по программе аспирантуры Института для сдачи кандидатского экзамена в порядке, утвержденном федеральным органом исполнительной власти, осуществляющим функции по выработке государственной политики и нормативно-правовому регулированию в сфере образования, допускается прикрепление к Институту лиц, имеющих высшее образование, подтвержденное дипломом специалиста или магистра, без освоения программы аспирантуры или обучавшихся по соответствующей не имеющей государственной аккредитации программе аспирантуры, подготавливающих диссертацию по соответствующей научной специальности, предусмотренной номенклатурой научных специальностей, утверждаемой Министерством образования и науки РФ (далее – научная специальность). Прикрепление к Институту лиц, осваивающих программу

аспирантуры в форме самообразования (вне организаций, осуществляющих образовательную деятельность), не допускается¹.

Трудоемкость учебной нагрузки обучающихся, осваивающих программу аспирантуры Института, при проведении промежуточной аттестации в форме кандидатского экзамена в соответствии с программой аспирантуры составляет 20 академических часов (далее – ак. ч.) и включает следующие виды учебной деятельности: проведение консультирования обучающихся по вопросам, включенным в Программу кандидатского экзамена (предэкзаменационное консультирование) – 4 ак. ч.; самостоятельная работа по подготовке к кандидатскому экзамену – 8 ак. ч.; проведение кандидатского экзамена – 8 ак. ч.

Прием кандидатского экзамена осуществляет создаваемая Институтком комиссия по приему кандидатского экзамена (далее – экзаменационная комиссия), состав которой утверждается приказом директора Института. Регламент работы экзаменационной комиссии определен ЛНА Института.

Цели и задача кандидатского экзамена

Цель кандидатского экзамена – осуществление контроля качества освоения учебных дисциплин программы аспирантуры Института, направленных на подготовку к сдаче кандидатского экзамена, в виде оценивания окончательных результатов обучения по комплексу указанных дисциплин.

Задача кандидатского экзамена – определение соответствия уровня сформированности компетенций, позволяющих лицам, сдающим кандидатский экзамен (далее – испытуемый), вести профессиональную деятельность в области биофизики (физико-математические науки), требованиям к результатам освоения вышеуказанных дисциплин, определенным программой аспирантуры Института, а также имеющегося у испытуемого теоретического (практического) задела для подготовки диссертации на соискание ученой степени кандидата наук по соответствующей научной специальности.

Испытуемый должен продемонстрировать:

– знания по учебным дисциплинам и развитость представлений о соответствующих фундаментальных работах, ключевых публикациях, знакомство с дополнительной тематической литературой на русском и

¹В соответствии с пп. 9 п. 1 ст. 33 и п. 3 ст. 34 Федерального закона «Об образовании в Российской Федерации» от 29.12.2012 № 273-ФЗ, п. 43 Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ от 19.11.2013 № 1259, п. 3 Порядка прикрепления лиц для сдачи кандидатских экзаменов, сдачи кандидатских экзаменов и их перечня, утвержденного Приказом Министерства образования и науки РФ от 28.03.2014 № 247, п. 3.1. ФГОС ВО по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ от 30.07.2014 № 867.

иностранном языке, способность аргументированно представлять свою точку зрения, излагая материал в логической последовательности;

– навыки владения понятийным аппаратом научных исследований и имеющийся научно-исследовательский потенциал, способность к самостоятельной работе, к анализу больших объемов научной информации;

– умение уверенно ориентироваться в проблематике своей предстоящей профессиональной деятельности.

Форма проведения и регламент кандидатского экзамена

Кандидатский экзамен проводится с сочетанием письменной и устной форм по вопросам, представленным в настоящей Программе кандидатского экзамена ниже.

Кандидатский экзамен состоит из двух частей.

Первая часть – развернутый, аргументированный ответ в письменной форме на вопросы из Перечня вопросов: каждый испытуемый индивидуально на усмотрение экзаменационной комиссии получает 3 вопроса, которые вместе формируют экзаменационный билет (Приложение).

На подготовку первой части кандидатского экзамена испытуемому отводится 60 минут.

Вторая часть – собеседование по вопросам первой части кандидатского экзамена и ответы в устной форме на дополнительные вопросы – вопросы из Перечня вопросов. Председатель и члены экзаменационной комиссии имеют право задать испытуемому не более 3 вопросов.

Испытуемый имеет право дополнить свой ответ письменными вычислениями, графиками и пр.

Продолжительность подготовки испытуемого к ответу на каждый вопрос второй части кандидатского экзамена – не более 5 минут.

Шкала и критерии оценивания результатов кандидатского экзамена

Результаты кандидатского экзамена определяются экзаменационной комиссией оценками «отлично» (5 баллов), «хорошо» (4 балла), «удовлетворительно» (3 балла) и «неудовлетворительно» (2 балла). Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение кандидатского экзамена.

Критерии оценки:

- знание материала, логика, аргументация ответа;
- умение приложить теорию к практике;
- уровень самостоятельного мышления.

Оценка «отлично» ставится испытуемому, ответ которого:

– на вопросы первой части кандидатского экзамена свидетельствует о глубоких знаниях программного содержания вышеуказанных учебных дисциплин и концептуально-понятийного аппарата, изложен в логической последовательности, аргументированно;

– указывает на способность применить теоретические знания при решении практических задач;

– на вопросы второй части кандидатского экзамена дан по существу и не содержит неточностей.

Оценка «хорошо» ставится испытуемому, ответ которого:

– на вопросы первой части кандидатского экзамена свидетельствует о твердых знаниях программного содержания вышеуказанных учебных дисциплин и концептуально-понятийного аппарата, изложен в логической последовательности, аргументированно;

– указывает на способность применить теоретические знания при решении практических задач;

– на вопросы второй части кандидатского экзамена дан по существу, но содержит отдельные непринципиальные погрешности и неточности.

Оценка «удовлетворительно» ставится испытуемому, ответ которого:

– на вопросы первой части кандидатского экзамена свидетельствует о поверхностных знаниях программного содержания вышеуказанных учебных дисциплин и концептуально-понятийного аппарата, достаточных для предстоящей работы в области профессиональной деятельности, изложен в логической последовательности или с некоторым нарушением логической последовательности, аргументированно или недостаточно аргументированно;

– указывает на достаточную способность применить теоретические знания при решении практических задач;

– на вопросы второй части кандидатского экзамена дан в основном по существу, вызывает незначительные затруднения и содержит непринципиальные погрешности и неточности.

Оценка «неудовлетворительно» ставится испытуемому, ответ которого:

– на вопросы первой части кандидатского экзамена свидетельствует о существенных пробелах в знаниях программного содержания вышеуказанных учебных дисциплин и концептуально-понятийного аппарата, изложен с существенным нарушением логической последовательности, аргументация слабая или отсутствует;

– указывает на слабую способность или неспособность применить теоретические знания при решении практических задач;

– на вопросы второй части кандидатского экзамена вызывает значительные затруднения и содержит принципиальные погрешности и неточности.

Перечень вопросов, выносимых на кандидатский экзамен

1. Второй закон термодинамики в биологии. Понятие термодинамического равновесия. Расчеты стандартных энергий реакций в биологических системах.
2. Стационарная кинетика ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен. Влияние различных факторов на кинетику ферментативных реакций (ингибиторы, активаторы, рН среды, ионы металлов).

- Современные представления о механизмах ферментативного катализа. Строение активного центра и электронные взаимодействия в фермент-субстратном комплексе.
3. Физико-химические механизмы стабилизации мембран. Фазовые переходы в мембранных системах. Вращательная, трансляционная подвижность фосфолипидов, флип-флоп переходы. Подвижность мембранных белков. Белок-липидное взаимодействие в мембранах.
 4. Общие понятия стабильности конфигурации молекул, энергия связи. Макромолекула как основа организации биоструктур. Своеобразие макромолекул как физического объекта. Водородные связи, силы Ван-дер-Ваальса и стабильность вторичной и третичной структуры. Поворотная изомерия и энергия внутреннего вращения.
 5. Изменение энтропии в открытых системах. Термодинамические условия осуществления стационарного состояния.
 6. Структурные и энергетические факторы, определяющие динамическую подвижность белков. Динамическая структура олигопептидов и глобулярных белков; конформационная подвижность.
 7. Макромолекула как основа организации биоструктур. Пространственная конфигурация биополимеров. Статистический характер конформации биополимеров.
 8. Классификация термодинамических систем. Первый и второй законы термодинамики в биологии. Теплоемкость и сжимаемость белковых глобул. Расчеты энергетических эффектов реакций в биологических системах.
 9. Применение линейной термодинамики в биологии. Термодинамические характеристики молекулярно-энергетических процессов в биосистемах.
 10. Основные понятия нелинейной термодинамики. Общие критерии устойчивости стационарных состояний и перехода к ним вблизи и вдали от равновесия.
 11. Сопряжение окислительного фосфорилирования и синтеза АТФ. Механизм работы протонной АТФ-синтазы митохондрий.
 12. Структурные основы сигнальной трансдукции в регуляторных белковых сетях. Доменное строение регуляторных белков.
 13. Применение метода графов для исследования стационарной кинетики ферментативных реакций. Влияние температуры на скорость реакций в биологических системах. Взаимосвязь кинетических и термодинамических параметров.
 14. Линейные и нелинейные процессы. Принцип «лимитирующей стадии» в биологических системах. Управляющие параметры. Быстрые и медленные переменные.
 15. Транспорт веществ через биомембраны. Пассивный и активный транспорт веществ через биомембраны. Транспорт неэлектролитов.
 16. Характеристика мембранных липидов. Динамика структурных элементов мембраны. Белок-липидные взаимодействия. Физико-химические

- механизмы стабилизации мембран. Вращательная и трансляционная подвижность фосфолипидов, флип-флоп переходы.
17. Иерархия амплитуд и времен релаксации конформационных движений. Связь характеристик конформационной подвижности белков с их функциональными свойствами.
 18. Динамика электронно-конформационных переходов. Роль воды в динамике белков. Роль конформационной подвижности в формировании ферментов и транспортных белков.
 19. Термодинамическое сопряжение реакций и тепловые эффекты в биологических системах. Понятие обобщенных сил и потоков. Линейные соотношения и соотношения взаимности Онзагера.
 20. Изменение энтропии в открытых системах. Постулат Пригожина. Термодинамические условия осуществления стационарного состояния. Связь между величинами химического сродства и скоростями реакций.
 21. Кооперативные свойства макромолекул. Типы объемных взаимодействий в белковых макромолекулах.
 22. Электронно-конформационные взаимодействия и релаксационные процессы в биоструктурах. Электронно-конформационные взаимодействия в фермент-субстратном комплексе. Образование многоцентровой активной конфигурации.
 23. Подвижность мембранных белков. Поверхностный заряд мембранных систем. Происхождение электрокинетического потенциала. Электрические свойства биомембран.
 24. Электродиффузионное уравнение Нернста – Планка. Описание ионных токов в модели Ходжкина – Хаксли.
 25. Активный транспорт. Электрогенный транспорт ионов. Участие АТФаз в активном транспорте ионов через биологические мембраны. Хемоосмотическая гипотеза Митчелла.
 26. Ионные каналы. Механизмы активации и инактивации каналов. Энергетическое сопряжение транспортных механизмов.
 27. Основные парадигмы сигнальной трансдукции. Белковые модули. Белок-белковые и белок-липидные взаимодействия. Не структурированные белки и их функции в передаче сигналов.
 28. Особенности пространственной организации белков и нуклеиновых кислот. Модели фибриллярных и глобулярных белков. Количественная структурная теория белка.
 29. Двадцать природных аминокислот, их структура и физико-химические свойства. Классы двадцати природных аминокислот.
 30. «Стандартные» третичные структуры. Кооперативные переходы в белках. Тепловая и холодовая денатурация, денатурация растворителем. Клубок и расплавленная глобула.
 31. Вклад стрессовых систем в репарацию ДНК. Направленная эволюция резистентности.
 32. Ключевые компоненты систем репарации. Универсальность систем репарации от прокариот до эукариот.

33. Современные представления о молекулярных механизмах резистентности и толерантности клеток к повреждениям ДНК.
34. Эволюция устойчивости по данным сравнительной геномики. Происхождение экстремальной устойчивости.
35. Общие принципы регуляции локализации и сортировки белков и липидов в определенных компартментах клетки.
36. Роль гистонов в экспрессии генов.
37. Основные принципы организации проведения внешних сигналов, получаемых клетками в организме и приводящих к реализации клеточных программ пролиферации, дифференцировки, апоптоза.
38. Молекулярные и клеточные события, сопровождающиеся возникновением злокачественных опухолей: сбой в реализации программы самоуничтожения – апоптоза и уход от контролирующего надзора иммунной системы.
39. Молекулярные и клеточные события, сопровождающиеся возникновением злокачественных опухолей: сбой в программе дифференцировки клеток и изменения в механизмах восприятия внеклеточных и проведения внутриклеточных сигналов.
40. Структурные основы сигнальной трансдукции в регуляторных белковых сетях. Не структурированные белки и их функции в передаче сигналов.
41. Муковисцидоз – «болезнь» хлорного канала.
42. Области применения магнитного резонанса в биологических исследованиях и медицине.
43. Анализ сверхслабых МС-сигналов, выделение сигнала из фона, алгоритмы разделения мультиплетов масс в масс-спектрах, анализ формы линии.
44. Сканирующая зондовая микроскопия, основанная на сканировании образца чрезвычайно острым (атомарных размеров) зондом.
45. Исследования ионных каналов в клетках, метод патч-кламп. Методы измерения концентрации ионов в клетках флуоресцентными зондами.
46. Биосинтез белка и его сворачивание *in vivo* и *in vitro*. «Парадокс Левинталя».
47. Молекулярные и клеточные основы возникновения злокачественных опухолей.
48. Взаимодействия в белках и их окружении. Кооперативные переходы в белках. Тепловая и холодовая денатурация, денатурация растворителем.
49. Молекулярные механизмы резистентности и толерантности клеток к повреждениям ДНК. Ключевые компоненты систем репарации.
50. Эпигенетический код и эпигенетическая регуляция.
51. Технологии диагностики поверхностных структур. Конфокальная оптическая микроскопия, электронная микроскопия, сканирующая зондовая микроскопия.
52. Многомерная протеомика. Метаболомика: основные направления развития.
53. Метод пептидного картирования. Метод секвенирования *de novo*.

54. Методологии анализа данных «снизу вверх» и «сверху вниз». Задачи протеомики.
55. Масс-спектрометры с одиночной и двойной фокусировкой. Квадрупольный масс-фильтр. Квадрупольная ионная ловушка. Использование ионно-циклотронного резонанса. Времяпролетная масс-спектрометрия. Масс-спектрометрия с Фурье-преобразованием.
56. Тандемная масс-спектрометрия. Разрешение и точность определения массы.
57. Классическая флуоресцентная микроскопия. Двух- и трехфотонное возбуждение. Флуоресцентно-резонансный перенос энергии. Природные флуоресцирующие белки. Флуоресцентная спектроскопия одиночных молекул.
58. Электронная микроскопия. Просвечивающие и сканирующие электронные микроскопы. Электронные пучки. Особенности электронно-микроскопического изображения. Система регистрации изображения.
59. Макромолекулярная рентгеновская кристаллография и нейтронография. Обратная кристаллическая решетка. Сфера Эвальда. Структурные факторы. Симметрия пространственной группы.
60. Длина рассеяния. Сечение рассеяния. Когерентное и некогерентное рассеяние. Упругое и неупругое рассеяние. Суммирование волн. Преобразование Фурье. Обратное пространство. Фазовая проблема.
61. Малоугловое рассеяние. Разбавленные растворы тождественных частиц. Аппроксимация Гинье. Интенсивность прямого рассеянного излучения и радиус инерции. Соотношение Порода.
62. Функция распределения расстояний. Полидисперсные растворы. Взаимодействующие частицы. Вариация контраста в рассеянии рентгеновских лучей и нейтронов. Информативность данных малоуглового рассеяния, модели и имитация.
63. Рентгеновская и нейтронная дифракция. Рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов. Энергия, импульс и длина волны. Рассеяние на точечном рассеивателе.
64. Технические задачи и кристаллографическая модель. Рост кристаллов. Сбор и обработка данных. Способы решения фазовой проблемы. Оптимизация кристаллографической модели. Окончательная оценка структуры. Нейтронная кристаллография.
65. Абсорбционная спектроскопия в ультрафиолетовой и видимой областях. Спектры поглощения белков и нуклеиновых кислот в видимой и УФ-областях. Абсорбционная спектроскопия в инфракрасной области. Спектроскопия комбинационного рассеяния.
66. Резонансная спектроскопия комбинационного рассеяния, разрешенная во времени. Оптическая активность. Квантовые точки.
67. Метод ЯМР. Роль ЯМР в исследовании пространственной организации макромолекул и их динамики.

68. Метод ЯМР. Классическое и квантово-механическое описание ЯМР. Влияние окружения на спектры ЯМР. Химические сдвиги. Спин-спиновое взаимодействие. ЯМР-спектроскопия с Фурье-преобразованием.
69. Сравнение структуры в кристалле и растворе. Неупорядоченные структуры в белках.
70. ЯМР в исследовании структуры и динамики макромолекул. Пространственное разрешение. Источники геометрической информации. Трехмерная структура биологических макромолекул. Динамика биологических макромолекул.
71. Ядерный эффект Оверхаузера. Двумерный ЯМР. Многомерный гомо- и гетероядерный ЯМР. Стерически наведенная ориентация молекул в растворе. ЯМР в твердой фазе.
72. Оптические ловушки (лазерные пинцеты). Магнитные ловушки (магнитные пинцеты). Принцип действия оптического твизера. Исследование межмолекулярных взаимодействий с помощью твизера.
73. Круговой дихроизм с использованием синхротронного излучения. Спектрометры кругового дихроизма.
74. Молекулярная механика. Понятие о силовых полях. Функция радиального распределения атомов. Методы молекулярной динамики. Термостаты и баростаты.
75. Поверхность потенциальной энергии. Внутренние координаты. Стационарные точки, матрица Гесса.
76. Вторичная структура полипептидов. Спирали: 2_7 , 3_{10} , α , $\text{poly}(\text{Pro})$. Антипараллельная и параллельная β -структура. β -изгибы.
77. Молекулярные поверхности различного типа и методы их расчета в белках.
78. Ван-дер-ваальсовое взаимодействие. Разрешенные конформации аминокислотных остатков. Карты Рамачандрана для разрешенных конформаций аминокислотного остатка (глицин, аланин, валин, пролин).
79. Методы учета растворителя в молекулярном моделировании.
80. Компьютерное оборудование и программное обеспечение для различных методов молекулярного моделирования. Пакеты программ для молекулярного моделирования и молекулярной динамики биомacroмолекул в водном окружении.
81. Терапевтическая мишень. Связь терапевтической мишени и биологической активности. Правила Липинского. Основные стратегии поиска и молекулярного конструирования биологически активных соединений.
82. Влияние водного окружения. Электростатические взаимодействия. Водородные связи. Гидрофобные взаимодействия.
83. Оптимизация равновесной геометрии молекулы. Алгоритмы оптимизации геометрии (методы наискорейшего спуска, сопряженных градиентов, с использованием второй производной). Критерии окончания поиска и сходимости минимизации.
84. Самоорганизация белков. «Парадокс Левинталя» и его решение. Нуклеационный механизм сворачивания. Интермедиаты и ловушки. Роль шаперонов.

85. Методы молекулярной механики. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярного взаимодействия. Вклад валентных связей, валентных и торсионных углов, плоских групп, ван-дер-ваальсовых, кулоновских и гидрофобных взаимодействий.
86. Представление о подходах к предсказанию вторичных и пространственных структур белков по их аминокислотным последовательностям и к «опознаванию» этих структур по гомологии последовательностей. «Шаблоны».
87. Теоретические методы конформационного анализа. Метод систематического поиска. Метод Монте-Карло. Конформационный анализ методами молекулярной динамики.
88. Моделирование систем со связями. Жесткие блоки. Алгоритмы SHAKE и LINCS.
89. Методы Монте-Карло. Методы молекулярной динамики. Методы *ab initio*. Условия применимости классической динамики. Силовое поле в молекулярной динамике.
90. Свойства боковых групп аминокислотных остатков. Неполярные, короткие полярные и длинные полярные боковые группы. Заряженные группы. Цистеины.
91. Начальные данные для молекулярной динамики. Базы данных, содержащие структуры белков. Формат данных PDB. Подготовка данных.
92. Гидрофобные взаимодействия в белках. Энтропийная природа гидрофобных взаимодействий.
93. Протоколы термодинамического уравнивания исследуемых молекулярных систем в молекулярной динамике.
94. Влияние водного окружения на электростатические взаимодействия. Электрическое поле у поверхности и внутри белка. Диэлектрическая проницаемость. Экранировка зарядов в солевых растворах. Измерение электрических полей в белках при помощи белковой инженерии. Дисульфидные связи. Координационные связи.
95. Строение α -белков. Пучки и слои спиралей. Модель квазисферической глобулы из α -спиралей. Плотная упаковка при контакте α -спиралей. Строение α/β -белков: параллельный β -слой, прикрытый α -спиралями, и α/β -цилиндр. Топология β - α - β субъединиц. Строение $\alpha+\beta$ белков. Отсутствие прямой связи архитектуры белка с его функцией.
96. Использование статистическо-механической модели AGADIR для расчета конформационной стабильности коротких альфа-спиральных пептидов.
97. Водородные связи. Их электрическая природа. Их энергия. Их геометрия в кристаллах.
98. Программное обеспечение и методы анализа крупномасштабной конформационной подвижности в белках.
99. Дальнодействующие потенциалы. Радиус обрезания. Расчеты кулоновских взаимодействий: прямой расчёт, суммы Эвальда, методы частица-сетка (PME). Граничные условия.

Рекомендуемая литература

1. Антонов, В.Ф. Физика и биофизика : учебник / В.Ф. Антонов, Е.К. Козлова, А.М. Черныш. – М. : ГЭОТАР-медиа, 2014.
2. Артюхов, В.Г. Биофизика / В.Г. Артюхов. – М. : Академический проект, 2013.
3. Блюменфельд, Л.А. Проблемы биологической физики / Л.А. Блюменфельд. – М., 1977.
4. Волькенштейн, М.В. Биофизика: учебное пособие / М.В. Волькенштейн. – СПб. : Лань, 2012.
5. Джаксон, М.Б. Молекулярная и клеточная биофизика / М.Б. Джаксон ; пер. с англ. – М. : Бином, 2015.
6. Кантор, Ч. Биофизическая химия. В 3 т. / Ч. Кантор, П. Шиммел. – М. : Мир, 1984.
7. Птицын, О.Б. Физика белка / О.Б. Птицын, А.В. Финкельштейн. – М. : Книжный дом Университет, 2014.
8. Рубин, А.Б. Проблемы регуляции в биологических системах. Биофизические аспекты : сборник монографий / А.Б. Рубин. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2007 (ISBN: 978-5-93972-567-5).
9. Рубин, А.Б. Биофизика. В 3 т. / А.Б. Рубин. – М. : Институт компьютерных исследований, 2013.
10. Сердюк, И. Методы в молекулярной биофизике. Структура. Функция. Динамика. В 2 т. / И. Сердюк, Н. Заккаи, Д. Заккаи. – М. : Книжный дом Университет, 2010.
11. Френкель, Д. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям / Д. Френкель, Б. Смит. – М. : Научный мир, 2013.
12. Хохлов, А.Р. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров / А.Р. Хохлов, А.Л. Рабинович, В.А. Иванов. – М. : Либроком, 2009.
13. Allewell, N.M. Molecular Biophysics for the Life Sciences / N.M. Allewell, L.O. Narhi, I. Rayment (Eds.). – Springer, 2013 (ISBN 978-1-4614-8547-6).
14. Bohr, H.G. Handbook of Molecular Biophysics / H.G. Bohr, F.B. Malik. – Weinheim : Wiley-VCH, 2009 (ISBN: 978-3-527-40702-6).
15. Kukol, A. Molecular Modeling of Proteins / A. Kukol (ed.). – Springer, Humana Press, 2015 (ISBN 978-1-4939-1464-7).
16. Nolting, B. Methods in Modern Biophysics / B. Nolting. – Springer, 2010 (ISBN 978-3-642-03022-2).

*Образец экзаменационного билета для сдачи кандидатского экзамена
по специальной дисциплине*

**Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
(НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)**

Направление подготовки: 03.06.01 Физика и астрономия
Направленность: 03.01.02 Биофизика
(физико-математические науки)

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ

1. Вопрос: _____
2. Вопрос: _____
3. Вопрос: _____

Время на подготовку в письменной форме ответов на вопросы составляет 60 минут.
Ответы должны быть полными, развернутыми, аргументированными, логически выстроенными.
Рекомендуется дополнять ответ на каждый из вопросов графиками, таблицами, вычислениями и т.п.