

Документ подписан простой электронной подписью
 Информация о владельце:
 ФИО: Лиховид Андрей Александрович
 Должность: И.о. декана медико-биологического факультета
 Дата подписания: 19.06.2024 13:56:06
 Уникальный программный ключ:
 842008d9d07ceade57ed427af5dd71c9bdc6tab6

Аннотация дисциплины

Наименование дисциплины	Компьютерное моделирование биологических макромолекул
Краткое содержание	Тема 1. Обзор биоинформатических баз данных, поисковых систем и протеомных порталов Банк белковых структур Protein Data Bank, формат файла координат, связь с другими биоинформатическими базами данных. Порталы баз протеомных данных и инструментов поиска, извлечения и анализа информации. Обзор набора инструментов на портале Exrasy Proteomics Tools, анализ и сравнение аминокислотных последовательностей. Тема 2. Обзор методов молекулярного моделирования, предпосылки и перспективы Развитие вычислительной биологии. Методы исследования структуры макромолекул. Предпосылки развития компьютерных методов моделирования структуры биологических молекул. Проблема фолдинга белка и предсказание нативной структуры из аминокислотной последовательности. Изучение динамики структурных изменений в биомолекулах и их комплексах. Изучение биофизических и термодинамических свойств биомолекулярных систем. Уровни детализации молекулярного моделирования Тема 3. Молекулярная механика Основная идея и фундаментальные принципы молекулярной механики: термодинамическая гипотеза, принцип аддитивности, принцип дополнительности. Молекулярное силовое поле, аппроксимации. Функциональная часть силового поля. Параметры силового поля. Потенциал ковалентной связи. Вибрации углов. Торсионные углы. Неправильные торсионные углы. Невалентные взаимодействия Тема 4. Молекулярная динамика Идея молекулярной динамики. Алгоритм программной реализации метода равновесной молекулярной динамики. Начальная конформация. Начальное распределение скоростей. Вычисление атомарных сил. Интегрирование уравнений движения. периодические граничные условия. Уровни детализации молекулярного моделирования. Тема 5. Программный пакет VMD и подготовка к моделированию Файл координат. Возможности молекулярных визуализаторов. Просмотр трехмерного изображения молекулы, выделение функционально-важных структур, структурное выравнивание Подготовка к моделированию: начальные координаты, создание топологии системы, формат файла топологии. Добавление растворителя и ионов. Тема 6. Молекулярная динамика с использованием пакета NAMD

[illegible]

[illegible]