

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Лиховид Андрей Александрович

Должность: И.о. декана медико-биологического факультета

Дата подписания: 03.07.2025 10:04:13

Уникальный программный ключ:

842008d9d07cedde74e417403fa21c9bdc6c9b6

Аннотация дисциплины

Наименование дисциплины	Компьютерное моделирование биологических макромолекул
Содержание	Принципы структурной организации белков Базы данных белковых структур Метод эмпирического силового поля в моделировании биомолекул Метод молекулярной механики Метод молекулярной динамики Программный пакет VMD и подготовка к моделированию Приложения молекулярной динамики LAMMPS и NAMD Виртуальный скрининг и молекулярный докинг. Подготовка системы Алгоритмы докинга Фильтрация результатов виртуального скрининга
Результаты освоения дисциплины (модуля)	Готовность решать задачи и реализовывать проекты в области биологии Способность применять современные информационные технологии для решения задач профессиональной деятельности.
Трудоемкость, з.е.	3
Формы отчетности	Экзамен
Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины	
Основная литература	1. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х. -Д. Хельтзе, В. Зиппл, Д. Роньян, Г. Фолькерс ; перевод А. А. Олиференко [и др.]. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 320 с. — ISBN 78-5-00101-724-0. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/40388.html 2. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 384 с. — ISBN 978-5-8114-1032-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/210257
Дополнительная литература	1. Каплан, И. Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / И. Г. Каплан ; перевод Д. С. Безруков, И. Г. Рябинкин ; под редакцией Н. Ф. Степанова. — Москва : Лаборатория знаний, 2023. — 395 с. — ISBN 978-5-93208-648-3. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/129443.html 2. Молекулярно-динамическое моделирование в пакете LAMMPS : учебно-методическое пособие / составители Д. С. Куцова [и др.]. — Воронеж : ВГУ, 2018. — 43 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/171167 3. Юрчук, С. Ю. Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур. Моделирование наносистем

	методами молекулярной динамики : курс лекций / С. Ю. Юрчук. — Москва : Издательский Дом МИСиС, 2013. — 47 с. — ISBN 978-5-87623-663-0. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/56067.html 4. Вознесенский, Э. Ф. Компьютерная визуализация нанообъектов : учебное пособие / Э. Ф. Вознесенский, И. В. Красина. — Казань : КНИТУ, 2016. — 84 с. — ISBN 978-5-7882-2003-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/102068
--	---