



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего образования
 «Дальневосточный федеральный университет»
 (ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК ДВФУ

«СОГЛАСОВАНО»
 Руководитель ОП

«УТВЕРЖДАЮ»
 Заведующий кафедрой
 Биоорганической химии и биотехнологии



С. Стоник Стоник В.А.
 (подпись) (Ф.И.О. рук. ОП)
 «08» сентября 2017 г.

С. Стоник Стоник В.А.
 (подпись) (Ф.И.О. зав. каф.)
 «08» сентября 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
 Основы компьютерного моделирования
Специальность 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
 специализация «Медицинская химия»
Форма подготовки очная

- курс 5 семестр 9
- лекции 18 часов
- практические занятия 54 часа.
- лабораторные работы -/- час.
- в том числе с использованием МАО лек.18/пр. 36 час.
- всего часов аудиторной нагрузки 72 час.
- в том числе с использованием МАО 54 час.
- самостоятельная работа 108 час.
- в том числе на подготовку к экзамену 27 час.
- контрольные работы (количество) не предусмотрены
- курсовая работа / курсовой проект -/- семестр
- зачет 9 семестр
- экзамен 9 семестр

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями федерального государственного образовательного стандарта высшего образования, утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ от 12.09.2016 № 1174.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры Биоорганической химии и биотехнологии ШЕН протокол № 1 от «08» сентября 2017 г.
 Заведующий кафедрой Биоорганической химии и биотехнологии ШЕН академик В.А. Стоник

Составитель: к.ф.-м.н. Г.Н. Лихацкая

I. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

II. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

ABSTRACT

Specialist's degree in 04.05.01 Fundamental and Applied Chemistry

Specialization "Medical Chemistry"

Course title "Basics of Computer Modeling"

Variation part of Block, 5 credits.

Instructors: Likhatskaya G. N.

At the beginning of the course a student should be able to:

For successful study of "Basics of Computer Modeling in Chemistry" discipline preliminary competences should be formed:

- The ability to abstract thinking, analysis, synthesis (GC-1).
- The ability to perceive, to develop and use the theoretical foundations of traditional and new sections of chemistry in solving professional problems (GPC-1).
- The proficiency chemical experiment, the main synthetic and analytical methods of preparation and research chemicals and reactions (GPC-2).
- The willingness to manage a team in their professional activities, tolerant to perceive social, ethnic, religious and cultural differences (GPC-8)
- The ability to conduct scientific research on the subject and have formulated new scientific and applied results (SPC-1).
- The ownership system of fundamental chemical concepts and methodological aspects of chemistry, forms and methods of scientific knowledge (SPC-3).

Learning outcomes:

- The ability to meet the challenges of professional activities on the basis of the information and bibliographic culture of using information and communication technologies and computational tools with the main information security requirements (GPC-4).
- Possession of modern computer technologies in planning studies, receiving and processing of the results of scientific experiments, collecting, processing, storing, transmitting and presentation of scientific information (SPC-10).

Course description:

Discipline "Basics of Computer Modeling" promotes the formation of the students' basic structural concepts in the field of bioorganic chemistry and biotechnology and obtaining more knowledge about the structure of biomolecules and their complexes at the atomic level. Course "Basics of Computer Modeling" is preceded necessary for its understanding of the courses "Organic Chemistry", "Bioorganic Chemistry", "Physical Chemistry", "Biology with the fundamentals of ecology". Discipline promotes the acquisition of skills in the field of construction and analysis of three-dimensional structures of biomolecules and their complexes with the help of computer and information technologies. For successful learning course

requires a good knowledge of organic chemistry and biomolecular classification. It is necessary to have a basic knowledge in the field of bioorganic chemistry, to know the principles of the structure of proteins, peptides, nucleic acids, carbohydrates and low molecular weight metabolites. You need to know the basics of the structural unit of proteins and peptides, nucleic acids, carbohydrates, lipids, and the main groups of low molecular weight metabolites, including primary, secondary and tertiary structure of proteins and biopolymers.

Main course literature:

1. Helte H.-D., Zippl V., Ronyan D., G. Folkers Molecularnoe modelirovanie. Teoriya i praktika [Molecular modeling. Theory and practice].- M.: Binom. Laboratoriya znaniy, 2009. - 318 p. (rus) - Access: <http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:668199&theme=FEFU>

2. Lesk A. Vvedenie v bioinformatiku [Introduction to bioinformatics].- M.: Binom. Laboratoriya znaniy, 2009. - 318 p. (rus) - Access: <http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:288426&theme=FEFU>

3. Coleman J. Naglyadnaya bioximiya [Visual Biochemistry].- M.: Binom, Laboratoriya znaniy, 2012. - 469 p. (rus) - Access: <http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:288823&theme=FEFU>

4. Tyukavkina N.A. Bioorganicheskaya himiya: rukovodstvo k prakticheskim zanyatiyam: ucheb. posobie [Bioorganic Chemistry: A Guide to practical training: Proc. Manual]. - M.: GEOTAR Media, 2014. - 168 p (rus). Access: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970431887.html>

5. Romanovskij I.V., Boltromeyuk V.V., Gidranovich L.G. Bioorganicheskaya himiya: uchebnoe posobie [Bioorganic Chemistry: Textbook]. - M.: NIC INFRA-M, Nov. znanie, 2015. - 504 p (rus). Access: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=502950>

Form of final knowledge control: exam.

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Основы компьютерного моделирования»

Рабочая программа учебной дисциплины «Основы компьютерного моделирования» разработана для студентов 5 курса специализации 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, специализация «Медицинская химия» в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению. Входит в вариативную часть учебного плана, дисциплины по выбору: Б1.В.ОД.2.3. Трудоемкость дисциплины 5 зачетных единиц, 180 часов. Дисциплина включает 18 часов лекций, 54 часа практических занятий и 108 часов самостоятельной работы (из них 27 часов отведены на экзамен), завершается экзаменом. Реализуется в 9 семестре.

Курсу «Основы компьютерного моделирования» предшествуют необходимые для его понимания курсы: «Органическая химия», «Биоорганическая химия», «Физическая химия», «Биология с основами экологии». Дисциплина «Основы компьютерного моделирования» способствует формированию у студентов основных структурных представлений в области биоорганической химии и биотехнологии и получению более глубоких знаний о строении биомолекул и их комплексов на атомном уровне. Приобретение навыков в области построения и анализа пространственных структур биомолекул и их комплексов с помощью компьютерных и информационных технологий. Для успешного изучения курса необходимо хорошее знание органической химии и классификации биомолекул. Необходимо иметь базовые знания в области биоорганической химии, знать принципы строения белков, пептидов, нуклеиновых кислот, углеводов и низкомолекулярных метаболитов. Необходимы общие представления о работе с компьютерами и программами. Необходимо знать основы структурного устройства белков и пептидов, нуклеиновых кислот, углеводов, основных групп липидов и низкомолекулярных метаболитов, включая первичную, вторичную и третичную структуры белков и биополимеров. Дисциплина «Основы компьютерного моделирования» способствует формированию у студентов основных структурных представлений в области биоорганической химии и биотехнологии и получению более глубоких знаний о строении биомолекул и их комплексов на атомном уровне. Приобретение навыков в области построения и анализа пространственных структур биомолекул и их комплексов с помощью компьютерных и информационных технологий.

Цель освоения дисциплины «Основы компьютерного моделирования» состоит в обучении студентов компьютерным технологиям для изучения и анализа структуры биомолекул и моделирования их комплексов; в освоении современных компьютерных методов для решения задач биоорганической и медицинской химии, биотехнологии и дизайна новых лекарственных препаратов.

Задачи:

- освоение программ, методов моделирования и анализа пространственных структур всех классов биомолекул;
- обучение работе с современными базами данных по структуре биомолекул;
- освоение программ по молекулярному докингу и молекулярной динамике с использованием высокопроизводительных вычислительных систем и параллельных вычислений.

Для успешного изучения дисциплины «Основы компьютерного моделирования» у обучающихся должны быть сформированы следующие знания и умения, соответствующие предварительным компетенциям:

- Способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1).
- Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1).
- Владение навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций (ОПК-2).
- Готовность руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия (ОПК-8).
- Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1),
- Владение системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания (ПК-3).

В результате изучения данной дисциплины у обучающихся формируются следующие компетенции:

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
Способность решать задачи профессиональной	Знает	принципы структурной организации и моделирования структуры биомолекул.

деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-4)	Умеет	применять полученные знания при исследовании биологических молекул; решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности.
	Владеет	базовыми навыками для моделирования и интерпретации полученных результатов; методами решения задач профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности.
Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации (ПК-6)	Знает	методологию проведения структурно-функциональных исследований биологически активных соединений различных классов с использованием компьютерных технологий.
	Умеет	определять цель и задачи исследования, планировать и проводить эксперименты с использованием компьютерных технологий.
	Владеет	навыками поиска и критического анализа информации по тематике проводимых исследований; навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов; навыками использования современных программ и пакетов программ по компьютерному моделированию биомолекул.

Для формирования вышеуказанных компетенций в рамках дисциплины «Основы компьютерного моделирования» применяются следующие методы активного/интерактивного обучения: лекции-беседы, проблемные лекции.

I. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА (18 часов)

Раздел I. Основы компьютерного моделирования биомолекул (5 час.)

Тема 1. Применение компьютерных технологий в биоорганической химии и биотехнологии (1 час).

Современное развитие компьютерной техники и информационных технологий. Повышенные требования к компьютерной технике при решении задач в области наук о жизни. Структурная биоинформатика (определение, предмет и методы исследования). Примеры использования биоинформатики для решения задач биотехнологии, биоорганической и медицинской химии. Дизайн лекарств и установление молекулярных механизмов действия.

Тема 2. Основы представления структуры биомолекул на компьютере и история визуализации молекул (2 час.).

Теоретические основы строения молекул и современные экспериментальные методы установления структуры - основа представления молекул с помощью компьютера. Развитие методов визуализации молекул - от

физических моделей до 3D-структур на компьютере, от атомов и молекул, до модели клетки.

Тема 3. Современные базы данных по структуре биомолекул (2 час.)

Базы данных - компьютерные программы для сбора, хранения и обработки информации. Первичные и вторичные базы данных. Особые инструменты для работы с базами данных. Примеры баз по молекулярной биологии.

Раздел II. Особенности моделирования структуры белков и других биополимеров (7 час.)

Тема 1. Особенности структуры и классификации белков. Базы данных по 3D-структуре белков (2 час.)

Первичная, вторичная и третичная структура белка. Системы классификации белков. Семейства белков. Первичные и вторичные базы данных по пространственной структуре и свойствам белков.

Тема 2. Предсказание пространственной структуры белка по аминокислотной последовательности методом сравнительного моделирования. Современные интернет-серверы для моделирования 3D-структуры белков (3 час.)

Основы метода сравнительного моделирования пространственной структуры белков. Методы поиска прототипа. Выбор прототипа. Построение модели с использованием нескольких прототипов. Проверка качества построенной модели. Предсказательная сила модели. Ограничения метода сравнительного моделирования структуры белков. Современные программы по построению моделей белков. Интернет-серверы для построения моделей белков. Примеры работы с серверами.

Тема 3. Моделирование олигомерных белковых комплексов. Оптимизация 3D-структуры биомолекул методом молекулярной динамики (2 час.)

Методы построения олигомерных белков с помощью программ и серверов по моделированию. Современные методы оптимизации структуры молекул. Методы минимизации энергии молекул и потенциалы сил. Методы молекулярно-динамической симуляции молекул в реалистичных биохимических условиях с использованием высокопроизводительных и параллельных вычислений.

Раздел III. Изучение 3D-структуры комплексов биомолекул и применение моделирования для решения химических задач и в биотехнологии (6 час.)

Тема 1. Виды и алгоритмы молекулярного докинга. Молекулярный докинг с «жестким» и «подвижным» лигандом (2 час.).

Основы метода молекулярного докинга. Анализ комплексов с установленной структурой и разработка компьютерных методов для "геометрического" или "жесткого" докинга, докинга с подвижным лигандом и подвижным рецептором. Особенности и требования для разных типов докинга. Анализ результатов докинга.

Тема 2. Молекулярный докинг для поиска ингибиторов белков-мишеней. Моделирование комплексов белок-лиганд и белок-белок (2 час.)

Ферменты как мишени для создания новых лекарств. Поиск потенциальных ингибиторов ферментов и дизайн лекарственных средств с использованием методов молекулярного докинга. Поиск потенциальных белков-мишеней для низкомолекулярных соединений и пептидов. Поиск ингибиторов белок-белкового взаимодействия.

Тема 3. Молекулярный докинг для поиска противовоспалительных и противовирусных соединений (2 час.).

Актуальность разработки новых препаратов с установленным механизмом действия. Поиск соединений в базах химических структур и библиотеках, действующих на заданные белки-мишени, с использованием методов молекулярного докинга. Использование компьютерных технологий для создания новых противовоспалительных и противовирусных препаратов и прогноза возможного побочного действия.

II. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА **Практические занятия (54 часа)**

Занятие 1. Пространственная структура молекул и ее визуализация (3 час.).

Знакомство с форматами файлов для описания структуры молекул, способами визуализации структуры молекул и расчетом физико-химических свойств молекул с помощью компьютерных программ.

Занятие 2. Знакомство и обучение работе с молекулярными редакторами (RASMOL, RASTOP, VEGA ZZ, SPDBV) (3 час.).

Визуализация и анализ структуры молекул, расчета физико-химических свойств молекул с помощью компьютерных программ.

Занятие 3. Знакомство и обучение работе с молекулярными редакторами (MOE, Maestro, Discovery Studio) (3 час.).

Моделирование и анализ структуры молекул, расчета физико-химических свойств молекул с помощью компьютерных программ.

Занятие 4. Интернет-технологии для моделирования структуры молекул (ProDrg) (3 час.).

Базы данных по структуре низкомолекулярных соединений (CCDC, DrugBank, Zink).

Занятие 5. Знакомство с работой с современными базами данных (NCBI, Exrasy, EBI) по структуре молекул (3 час.).

Получение и анализ информации по первичной, вторичной и пространственной структуре белков, их физико-химическим свойствам и классификации.

Занятие 6. Знакомство с современными базами данных по структуре белков (PDB, PDBsum) (3 час.).

История создания и современное состояние баз по экспериментально установленным пространственным структурам белков и их комплексов. Особенности экспериментальных методов установления пространственной структуры белков. Работа с дополнительными инструментами для анализа информации, полученной в базах PDB, PDBsum.

Занятие 7. Основы метода сравнительного моделирования структуры белков по их аминокислотной последовательности (3 час.).

Анализ первичной структуры белка и поиск прототипа для построения модели пространственной структуры. Выравнивание аминокислотных последовательностей и оценка содержания идентичных и подобных аминокислотных остатков. Построение модели с помощью компьютерных программ, оптимизация структуры и оценка качества построенной модели. Современные программы для моделирования белков и пептидов.

Занятие 8. Моделирование структуры белков с помощью интернет-серверов Swiss-model, Phyre2, I-Tasser (3 час.).

Работа с интернет-серверами Swiss-model, Phyre2, I-Tasser по установлению пространственной структуры белков и пептидов, предсказанию свойств белков и структуры их комплексов. Сравнение структур, построенных разными серверами. Возможности и ограничения серверов Swiss-model, Phyre2, I-Tasser.

Занятие 9. Освоение методов оптимизации структуры молекул и их комплексов с использованием высокопроизводительных и параллельных вычислений и программы Gromacs (3 час.).

Методы оптимизации структуры биомолекул. Минимизация структуры молекул в реалистичных биохимических условиях. Молекулярно-динамическая симуляция молекул и их комплексов. Анализ данных по молекулярно-динамической симуляции. Проведение расчетов с использованием высокопроизводительных и параллельных вычислений (программы Gromacs

5.0) в режиме удаленного доступа рабочей станции с суперкомпьютером ЦКП "Дальневосточный вычислительный ресурс".

Занятие 10. Моделирование структуры биополимеров и их комплексов (3 час.).

Знакомство с особенностями моделирования углеводов и их комплексов. Потенциалы сил для моделирования структуры углеводов. Оптимизация структуры углеводов и их комплексов в воде. Моделирование структуры молекул смешанного строения, содержащих углеводный компонент.

Занятие 11. Моделирование структуры белков-мишеней: вирусных белков и ионных каналов (3 час.).

Моделирование и оптимизация структур секвенированных некоторых вирусных белков и ионных каналов, для которых не установлена пространственная структура. Подготовка моделей для использования в качестве белков-мишеней для поиска потенциальных модуляторов.

Занятие 12. Освоение методов молекулярного докинга белок-лиганд с помощью программы Autodock (3 час.).

Подготовка с помощью модуля AutoDockTools структуры молекул белка-мишени и лиганда для молекулярного докинга. Проведение докинга и анализ полученных результатов.

Занятие 13. Освоение методов молекулярного докинга белок-белок с помощью программы GRAMM (3 час.).

Особенности метода геометрического докинга. Выбор параметров для проведения докинга. Докинг низкого и высокого разрешения. Ограничения метода. Сравнение экспериментально установленных и предсказанных структур.

Занятие 14. Докинг вирусных белков-мишеней с низкомолекулярными лигандами для поиска и дизайна потенциальных ингибиторов (3 час.)

Проведение серии докингов белка-мишени и серии природных и синтетических низкомолекулярных соединений для поиска ингибиторов. Молекулярный докинг одного соединения с разными вирусными белками для поиска потенциальной мишени.

Занятие 15. Освоение методов молекулярного докинга белок-белок с помощью интернет-серверов (3 час.)

Работа с серверами GRAMM-X v.1.2.0, Cluspro, ZDOCK и DockingServer. Сравнение результатов, полученных с помощью разных серверов.

Занятие 16. Молекулярный докинг ионных каналов с пептидами и низкомолекулярными лигандами для поиска потенциальных модуляторов (3 час.).

Проведение докинга ионных каналов с пептидами и низкомолекулярными лигандами с помощью программ и серверов для докинга. Расчет энергии связывания лиганда с белком.

Занятия 17, 18. Молекулярный докинг рецепторов с пептидами и низкомолекулярными лигандами для поиска потенциальных модуляторов (6 час.).

Подготовка структур рецепторов и лигандов для проведения докинга. Проведение докинга рецепторов с пептидами и низкомолекулярными лигандами с помощью программ и серверов для докинга. Расчет энергии связывания лигандов с рецепторами и определение потенциальных модуляторов.

III. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Основы компьютерного моделирования» представлено в Приложении 1 и включает в себя:

план-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине, в том числе примерные нормы времени на выполнение по каждому заданию;

требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы;

критерии оценки выполнения самостоятельной работы.

IV. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций		Оценочные средства - наименование	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
1.	Раздел I. Основы компьютерного моделирования биомолекул Раздел II. Особенности моделирования структуры белков и других биополимеров	ОПК-4 ПК-6	Знает	Проверка готовности к практическим занятиям №№1-8. Собеседование (УО-1).	Экзаменационные вопросы №№1 – 18
			Умеет	Проверка отчетов по практическим занятиям №№1-8 (ПР -6).	

			Владеет	Проверка отчетов по практическим занятиям №№1-8 (ПР-6)	
2.	Раздел III. Изучение 3D-структуры комплексов биомолекул и применение моделирования для решения химических задач и в биотехнологии	ОПК-4 ПК-6	Знает	Проверка готовности к практическим занятиям №№9-17. Собеседование (УО-1).	Экзаменационные вопросы №№19–35
			Умеет	Проверка отчетов по практическим занятиям №№9-18(ПР -6).	
			Владеет	Проверка отчетов по практическим занятиям №№9-18 (ПР -6).	

Типовые контрольные задания, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений и навыков и (или) опыта деятельности, а также критерии и показатели, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, представлены в Приложении 2.

V. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

1. Леск, А. Введение в биоинформатику / А. Леск. пер с англ.: М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. – 318с.
<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:797691&theme=FEFU>
2. Хельтье, Х.-Д. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х.-Д. Хельтье, В. Зипшль, Д. Роньян (и др.).- М.: БИНОМ. Лаб. знаний, 2009. – 318с.
<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:288823&theme=FEFU>
3. Кольман, Я. Наглядная биохимия / Я. Кольман, К.-Г. Рем ; пер. с нем. Л. В. Козлова, Е. С. Левиной, П. Д. Решетова. – М.: БИНОМ, Лаб. знаний, 2012. - 469 с. <http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:668199&theme=FEFU>
4. Биоорганическая химия : учебник / Н. А. Тюкавкина, Ю. И. Бауков, С. Э. Зурабян. - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2015. - 416 с.
<http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970431887.html>
5. Биоорганическая химия: учебник / И.В. Романовский, В.В. Болтронеюк, Л.Г. Гидранович и др. - М.: НИЦ ИНФРА-М, Нов. знание, 2015. - 504 с.
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=502950>

Дополнительная литература

1. Биоорганическая химия: учебное пособие / Д. Г. Кнорре, Т. С. Годовикова, С. Д. Мызина [и др.]. - Новосибирск.: Изд-во Новосибирского университета, 2011. - 480 с.
<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:679690&theme=FEFU>
2. Биоорганическая химия : учебник / Н. А. Тюкавкина, Ю. И. Бауков, С. Э. Зурабян. - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2015. - 416 с.
<http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970431887.html>
3. Овчинников, Ю. А. Биоорганическая химия / Ю. А. Овчинников. – М.: Просвещение, 1987. – 816с.
<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:325131&theme=FEFU>
4. Принципы и методы биохимии и молекулярной биологии /под ред. : К. Уилсона, Дж. Уолкера ; пер. с англ. Т. П. Мосоловой, Е. Ю. Бозелек-Решетняк. – М.: БИНОМ. Лаб. Знаний, 2012. - 848с.
<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:705602&theme=FEFU>
5. Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка: Курс лекций с цветными и стереоскопическими иллюстрациями и задачами. – 3-е изд., испр. и доп.. – М.: КДУ, 2012, 2014. – 456 с.
<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:734335&theme=FEFU>

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. <http://e.lanbook.com/>
2. <http://www.studentlibrary.ru/>
3. <http://znanium.com/>
4. <http://www.nelbook.ru/>

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы

1. NCBI <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>
2. EBI <http://www.ebi.ac.uk/>
3. Uniprot <http://www.uniprot.org/>
4. Expasy <http://www.expasy.org/>
5. PDB <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
6. CCDC <http://www.ccdc.cam.ac.uk/pages/Home.aspx>
7. VEGA ZZ
http://nova.disfarm.unimi.it/cms/index.php?Software_projects:VEGA_ZZ
8. Maestro <http://www.schrodinger.com/>
9. DS <http://accelrys.com/products/discovery-studio/visualization-download.php>
10. Rasmol <http://rasmol.org/>
11. SPDBV <http://spdbv.vital-it.ch/>
12. Swiss-model <http://swissmodel.expasy.org/>

13. PMP <http://www.proteinmodelportal.org/>
14. Gromacs <http://www.gromacs.org/>
15. ProDrg2 <http://davapc1.bioch.dundee.ac.uk/cgi-bin/prodr2>
16. Cazy <http://www.cazy.org/>
17. Brenda <http://www.brenda-enzymes.org/>
18. Phyre2: <http://www.sbg.bio.ic.ac.uk/phyre2/html/page.cgi?id=index>

VI. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Рекомендации по планированию и организации времени, отведенного на изучение дисциплины

Время, отведённое на самостоятельную работу, должно быть использовано обучающимся планомерно в течение семестра.

Планирование – важнейшая черта человеческой деятельности. Для организации учебной деятельности эффективным вариантом является использование средств, напоминающих о стоящих перед вами задачах, и их последовательности выполнения. В роли таких средств могут быть ИТ-технологии (смартфоны, планшеты, компьютеры и т.п.), имеющие приложения/программы по организации распорядка дня/месяца/года и сигнализирующих о важных событиях, например, о выполнении заданий по дисциплине «Основы компьютерного моделирования».

Регулярность – первое условие поисков более эффективных способов работы. Рекомендуется выбрать день/дни недели для регулярной подготовки по дисциплине «Основы компьютерного моделирования», это позволит морально настроиться на выполнение поставленных задач, подготовиться к ним и выработать правила выполнения для них, например, сначала проработка материала лекций, чтение первоисточников, затем выделение и фиксирование основных идей. Рекомендуемое среднее время два часа на одно занятие.

Описание последовательности действий, обучающихся при изучении дисциплины

В соответствии с целями и задачами дисциплины студент изучает на занятиях и дома разделы лекционного курса, готовится к практическим занятиям, проходит контрольные точки текущей аттестации, включающие разные формы проверки усвоения материала (собеседование и др.).

Освоение дисциплины включает несколько составных элементов учебной деятельности:

1. Внимательное чтение рабочей программы учебной дисциплины (помогает целостно увидеть структуру изучаемых вопросов). В ней содержится

перечень контрольных испытаний для всех разделов и тем, включая зачёт; указаны сроки сдачи заданий, предусмотренных учебной программой курса дисциплины «Основы компьютерного моделирования».

2. Неотъемлемой составной частью освоения курса является посещение лекций и их конспектирование. Глубокому освоению лекционного материала способствует предварительная подготовка, включающая чтение предыдущей лекции, работу с учебниками.

3. Регулярная подготовка к практическим занятиям и активная работа на них, включающая:

- повторение материала лекции по теме;
- знакомство с планом занятия и списком основной и дополнительной литературы, с рекомендациями по подготовке к занятию;
- изучение научных сведений по данной теме в разных учебных пособиях;
- чтение первоисточников и предлагаемой дополнительной литературы;
- посещение консультаций с целью выяснения возникших сложных вопросов при подготовке к практическим занятиям.

4. Подготовка к экзамену (в течение семестра), повторение материала всего курса дисциплины.

Рекомендации по работе с литературой

Изучение дисциплины следует начинать с проработки тематического плана лекций, уделяя особое внимание структуре и содержанию темы и основных понятий. Изучение «сложных» тем следует начинать с составления логической схемы основных понятий, категорий, связей между ними. Целесообразно прибегнуть к классификации материала, в частности при изучении тем, в которых присутствует большое количество незнакомых понятий, категорий, теорий, концепций, либо насыщенных информацией типологического характера.

При работе с литературой обязательно выписывать все выходные данные по каждому источнику. Можно выписывать кратко основные идеи автора и иногда приводить наиболее яркие и показательные цитаты (с указанием страниц). Ищите аргументы «за» или «против» идеи автора.

Чтение научного текста является частью познавательной деятельности. Ее цель – извлечение из текста необходимой информации. От того насколько осознанно читающим собственная внутренняя установка (найти нужные сведения, усвоить информацию полностью или частично, критически проанализировать материал и т.п.) во многом зависит эффективность осуществляемого действия.

Используйте основные установки при чтении научного текста:

1. информационно-поисковая (задача – найти, выделить искомую информацию);
2. усваивающая (усилия читателя направлены на то, чтобы как можно полнее осознать и запомнить как сами сведения излагаемые автором, так и всю логику его рассуждений);
3. аналитико-критическая (читатель стремится критически осмыслить материал, проанализировав его, определив свое отношение к нему);
4. творческая (создает у читателя готовность в том или ином виде – как отправной пункт для своих рассуждений, как образ для действия по аналогии и т.п. – использовать суждения автора, ход его мыслей, результат наблюдения, разработанную методику, дополнить их, подвергнуть новой проверке).

Для работы с научными текстами применяйте следующие виды чтения:

1. библиографическое – просматривание карточек каталога, рекомендательных списков, сводных списков журналов и статей за год и т.п.;
2. просмотрное – используется для поиска материалов, содержащих нужную информацию, обычно к нему прибегают сразу после работы со списками литературы и каталогами, в результате такого просмотра читатель устанавливает, какие из источников будут использованы в дальнейшей работе;
3. ознакомительное – подразумевает сплошное, достаточно подробное прочтение отобранных статей, глав, отдельных страниц, цель – познакомиться с характером информации, узнать, какие вопросы вынесены автором на рассмотрение, провести сортировку материала;
4. изучающее – предполагает доскональное освоение материала; в ходе такого чтения проявляется доверие читателя к автору, готовность принять изложенную информацию, реализуется установка на предельно полное понимание материала;
5. аналитико-критическое и творческое чтение – два вида чтения близкие между собой тем, что участвуют в решении исследовательских задач. Первый из них предполагает направленный критический анализ, как самой информации, так и способов ее получения и подачи автором; второе – поиск тех суждений, фактов, по которым или в связи с которыми, читатель считает нужным высказать собственные мысли.

Основным для студента является изучающее чтение – именно оно позволяет в работе с учебной литературой накапливать знания в профессиональной области.

При работе с литературой можно использовать основные виды систематизированной записи прочитанного:

1. Аннотирование – предельно краткое связное описание просмотренной или прочитанной книги (статьи), ее содержания, источников, характера и назначения.
2. Планирование – краткая логическая организация текста, раскрывающая содержание и структуру изучаемого материала.
3. Тезирование – лаконичное воспроизведение основных утверждений автора без привлечения фактического материала.
4. Цитирование – дословное выписывание из текста выдержек, извлечений, наиболее существенно отражающих ту или иную мысль автора.
5. Конспектирование – краткое и последовательное изложение содержания прочитанного.

VII. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерный класс: (доска, 13 персональных компьютеров)

Компьютер (твердотельный диск - объемом 128 ГБ; жесткий диск - объем 1000 ГБ; форм-фактор - Tower; комплектуется клавиатурой, мышью, монитором AOC i2757Fm; комплектом шнуров эл. питания) модель - M93p 1

Мультимедийное оборудование:

Экран проекционный ScreenLine Trim White Ice 50 см черная кайма сверху, размер рабочей области 236x147 см

Документ-камера AVervision CP355AF

ЖК-панель 47", Full HD, LG M4716 CCBA

Мультимедийный проектор, Mitsubishi EW330U, 3000 ANSI Lumen, 1280x800

Сетевая видеочкамера Multipix MP-HD718

Для самостоятельной работы используется читальные залы Научной библиотеки ДВФУ с открытым доступом к фонду: Моноблок Lenovo C360G-i34164G500UDK. Интегрированный сенсорный дисплей Polymedia FlipBox.

Копир-принтер-цветной сканер в e-mail с 4 лотками Xerox WorkCentre 5330 (WC5330C). Скорость доступа в Интернет 500 Мбит/сек. Рабочие места для людей с ограниченными возможностями здоровья оснащены дисплеями и принтерами Брайля; оборудованы: портативными устройствами для чтения плоскочечатных текстов, сканирующими и читающими машинами видеоувеличителем с возможностью регуляции цветовых спектров; увеличивающими электронными лупами и ультразвуковыми маркировщиками.



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК ДВФУ

**УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ
РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ**

**по дисциплине «Основы компьютерного моделирования»
Специальность 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
Специализация «Медицинская химия»
Форма подготовки очная**

**Владивосток
2017**

План-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине

№ п/п	Дата/сроки выполнения	Вид самостоятельной работы	Примерные нормы времени на выполнение	Форма контроля
1.	Сентябрь-декабрь	Подготовка к выполнению заданий на практических работах №№ 1-18, оформление отчетов	81 час	Опрос перед началом занятия (УО-1). Сдача отчетов о выполнении практического занятия (ПР-6).
2.	Декабрь	Подготовка к экзамену	27 час.	Экзамен

Рекомендации по самостоятельной работе студентов

В соответствии с целями и задачами дисциплины студент изучает на занятиях и дома разделы лекционного курса, готовится к практическим занятиям, проходит контрольные точки текущей аттестации, включающие разные формы проверки усвоения материала (опрос, коллоквиумы и др.).

Самостоятельная работа включает подготовку к практическим занятиям (работа с литературой, проработка тем лекционных занятий), подготовку к собеседованиям, групповым дискуссиям, коллоквиумам и контрольным работам.

Самостоятельная работа может осуществляться индивидуально или группами студентов в зависимости от цели, объема, конкретной тематики самостоятельной работы, уровня сложности, уровня умений студентов.

Рекомендации по подготовке к практическим занятиям

Самостоятельная работа студентов по подготовке к практическим занятиям (собеседование, отчет) включает в себя проработку тематического плана лекций, уделяя особое внимание структуре и содержанию темы и основных понятий. Изучение «сложных» тем следует начинать с составления логической схемы основных понятий, категорий, связей между ними. Целесообразно прибегнуть к классификации материала, в частности при изучении тем, в которых присутствует большое количество незнакомых понятий, категорий, теорий, концепций, либо насыщенных информацией типологического характера.

В ходе подготовки к практическим занятиям необходимо изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, новыми публикациями в периодических изданиях. При этом учесть рекомендации преподавателя. Дорабатывать свой конспект лекции, делая в нем соответствующие записи из литературы, рекомендованной преподавателем. Целесообразно составить план-конспект своего выступления по вопросам практического занятия.

Виды плана по форме выражения:

1. Номинативный. Это самый краткий способ выражения плана: утвердительные односоставные предложения, главный член которых – в форме подлежащего, например: моделирование.

2. Вопросительный, или вопросный (каждый пункт плана представляет собой вопросительное предложение).

3. Цитатный (пункты плана – цитаты из исходного текста, которые отражают содержание будущего ответа).

4. Тезисный (пункты плана передают основные моменты содержания ответа, который потом легко воспроизвести).

Требования к содержанию плана:

1. План должен соответствовать теме, адекватно и достаточно полно отражать содержание ответа;

2. Пункты плана должны быть связаны внутренней логикой (второй пункт вытекает из первого, третий из второго и т.д.);

3. Части плана должны быть соразмерены.

Технология составления плана:

1. Прочитайте рекомендованную преподавателем литературу, определяя микротемы, которые раскрывают вопрос.

2. Разделите прочитанное на части.

3. Определите, с какой целью составляется план, и на основе этого решите, какой будет вид плана по форме выражения.

4. Дайте краткое наименование каждой части.

5. Проверьте получившийся план, скорректируйте его, учитывая требования.

6. Определите, достаточно ли адекватно передает структуру и содержание ответа составленный план.

7. В случае необходимости дополните или сократите план.

Требования к оформлению плана:

Пункты плана ответа должны быть единообразно оформлены, иметь единое основание деления.

Студенту рекомендуется следующая схема подготовки к практическому занятию:

1. Проработать конспект лекций;

2. Прочитать основную и дополнительную литературу, рекомендованную по изучаемому разделу;

3. Ответить на вопросы плана практического занятия;

4. Составить план-конспект своего выступления по вопросам практического занятия;

5. При затруднениях сформулировать вопросы к преподавателю.

Критерии оценивания плана-конспекта:

Параметр	Баллы
<ul style="list-style-type: none">• соответствие теме,• адекватно и достаточно полно отражено содержание ответа,• пункты плана связаны внутренней логикой,	100 – 86 (отлично)

<ul style="list-style-type: none"> • части плана соразмерены, • единообразное оформление, • единое основание деления. 	
<ul style="list-style-type: none"> • соответствие теме, • не достаточно полно отражено содержание ответа, • пункты плана связаны внутренней логикой, • части плана не соразмерены, • единообразное оформление, • единое основание деления. 	85 – 76 (хорошо)
<ul style="list-style-type: none"> • соответствие теме, • не достаточно полно отражено содержание ответа, • пункты плана не связаны внутренней логикой, • части плана не соразмерены, • единообразное оформление, • единое основание деления. 	75 – 61 (удовлетво- рительно)
<ul style="list-style-type: none"> • не соответствует теме, • не отражено содержание ответа, • пункты плана не связаны внутренней логикой, • части плана не соразмерены, • единообразное оформление, • единое основание деления. 	60-50 (неудовлетво- рительно)

В ходе практических работ студенты воспринимают и осмысливают новый учебный материал. Практические занятия носят систематический характер, регулярно следуя за каждой лекцией или двумя-тремя лекциями.

Практические работы выполняются согласно графика учебного процесса и самостоятельной работы студентов по дисциплинам. При этом соблюдается принцип индивидуального выполнения работ.

Каждый студент ведет рабочую тетрадь, оформление которой должно отвечать требованиям, основные которых следующие:

- на титульном листе указывают предмет, курс, группу, подгруппу, фамилию, имя, отчество студента; каждую работу нумеруют в соответствии с методическими указаниями, указывают дату выполнения работы;
- полностью записывают название работы, цель и принцип метода;
- в конце каждой работы делают вывод или заключение, которые обсуждаются при подведении итогов занятия.

Проведение практических работ включает в себя следующие этапы:

- постановку темы занятий и определение задач практической работы;
- определение порядка практической работы или отдельных ее этапов;
- непосредственное выполнение практической работы студентами;
- подведение итогов практической работы и формулирование основных выводов.

При подготовке к практической работе необходимо заранее изучить методические рекомендации по ее проведению. Обратить внимание на цель

занятия, на основные вопросы для подготовки к занятию, на содержание темы занятия.

Студент может сдавать практическую работу в виде написания реферата, подготовки слайдов, презентаций и последующей защиты его, либо может написать конспект в тетради, ответив на вопросы по заданной теме. Ответы на вопросы можно сопровождать рисунками, схемами и т.д. с привлечением дополнительной литературы, которую следует указать.

Для проверки академической активности и качества работы студента рабочую тетрадь периодически проверяет преподаватель.



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК ДВФУ

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

по дисциплине «Основы компьютерного моделирования»
Специальность 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
специализация «Медицинская химия»
Форма подготовки очная

Владивосток

2017

I. Паспорт оценочных средств по дисциплине «Основы компьютерного моделирования»

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
	Способность решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-4)	Знает
Умеет		применять полученные знания при исследовании биологических молекул; решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности.
Владеет		базовыми навыками для моделирования и интерпретации полученных результатов; методами решения задач профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности.
Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации (ПК-6)	Знает	методологию проведения структурно-функциональных исследований биологически активных соединений различных классов с использованием компьютерных технологий.
	Умеет	определять цель и задачи исследования, планировать и проводить эксперименты с использованием компьютерных технологий.
	Владеет	навыками поиска и критического анализа информации по тематике проводимых исследований; навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов; навыками использования современных программ и пакетов программ по компьютерному моделированию биомолекул.

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций	Оценочные средства - наименование		
			текущий контроль	промежуточная аттестация	
1.	Раздел I. Основы компьютерного моделирования биомолекул Раздел II. Особенности моделирования структуры белков и других биополимеров	ОПК-4 ПК-6	Знает	Проверка готовности к практическим занятиям №№1-8. Собеседование (УО-1).	Экзаменационные вопросы №№1 – 18
			Умеет	Проверка отчетов по практическим занятиям №№1-8 (ПР -6).	
			Владеет	Проверка отчетов по практическим занятиям №№1-8 (ПР-6)	
2.	Раздел III. Изучение 3D-структуры комплексов биомолекул и применение моделирования для решения химических задач и в биотехнологии	ОПК-4 ПК-6	Знает	Проверка готовности к практическим занятиям №№9-17. Собеседование (УО-1).	Экзаменационные вопросы №№19–35
			Умеет	Проверка отчетов по практическим занятиям №№9-18 (ПР -6).	
			Владеет	Проверка отчетов по	

II. Шкала оценивания уровня сформированности компетенций по дисциплине «Основы компьютерного моделирования»

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции		критерии	Показатели
Способность решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-4)	знает	принципы структурной организации и моделирования структуры биомолекул	знание принципов структурной организации и моделирования структуры биомолекул	Сформированные систематические представления о физико-химических свойствах, лежащих в основе функционирования биомолекул.
	умеет	применять полученные знания при исследовании молекул; предлагать или предполагать механизмы взаимодействия молекул.	умение применять полученные знания при исследовании молекул; умение предлагать или предполагать механизмы взаимодействия молекул.	Способность самостоятельно проводить поиск научной информации для планирования эксперимента; способность аргументировано предлагать или предполагать механизмы протекающих реакций.
	владеет	Базовыми навыками, необходимыми для интерпретации полученных результатов.	владение теорией химии природных соединений, знанием принципов современных экспериментальных методов, способностью спланировать исследование для достижения поставленной цели; методами решения задач профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности.	Способность самостоятельно применять базовые знания и методы, необходимые для моделирования и интерпретации полученных результатов

Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации (ПК-6)	знает	методологию проведения структурно-функциональных исследований биологически активных соединений различных классов.	знание методов и подходов для проведения структурно-функциональных исследований биологически активных соединений различных классов	Способность самостоятельно анализировать и подбирать подходы для проведения структурно-функциональных исследований биологически активных соединений различных классов
	умеет	определять цель и задачи исследования, планировать и осуществлять эксперименты <i>in silico</i>	умение определять цель и задачи исследования, планировать и осуществлять экспериментальное исследование	Способность самостоятельно планировать и осуществлять экспериментальное исследование
	владеет	навыками поиска и критического анализа информации по тематике проводимых исследований; навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов; навыками работы с компьютерными программами по моделированию.	владение навыками поиска и критического анализа информации по тематике проводимых исследований; навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов; навыками использования современных программ и пакетов программ по компьютерному моделированию биомолекул.	Способность осуществлять поиск и критический анализ информации по тематике проводимых исследований; планировать научное исследование, анализировать получаемые результаты и формулировать выводы.

**Методические рекомендации,
определяющие процедуры оценивания результатов освоения дисциплины
«Основы компьютерного моделирования»**

Промежуточная аттестация студентов по дисциплине «Основы компьютерного моделирования» проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной. В зависимости от вида промежуточного контроля по дисциплине и формы его организации могут быть использованы различные критерии оценки знаний, умений и навыков. Вид промежуточной аттестации, предусмотренный по данной дисциплине – экзамен в устной форме, с использованием соответствующих оценочных средств.

Вопросы к экзамену

1. Пространственная структура молекул и ее визуализация.
2. Форматы файлов для описания структуры молекул на компьютере.

3. Расчет физико-химических свойств молекул с помощью компьютерных программ
4. молекулярные редакторами (RASMOL, VEGA ZZ) для визуализации и анализа структуры молекул
5. Молекулярные редакторы (RASTOP, SPDBV) для визуализации и анализа структуры молекул
6. Молекулярные редакторы (MOE, Maestro) для визуализации и анализа структуры молекул
7. Молекулярные редакторы (Maestro, Discovery Studio) для визуализации и анализа структуры молекул
8. Интернет-технологии для моделирования структуры молекул (ProDrg)
9. Кембриджская База рентгеноструктурных данных низкомолекулярных соединений (CCDC)
10. База данных низкомолекулярных соединений (DrugBank)
11. База данных низкомолекулярных соединений Zink
12. базы данных (NCBI, ExPasy, EBI)
13. данных по структуре белков (PDB, PDBsum)
14. Основы метода сравнительного моделирования структуры белков по их аминокислотной последовательности.
15. Моделирование структуры белков с помощью интернет-серверов Swiss-model, Phyre2, I-Tasser.
16. Методы оптимизации структуры молекул и их комплексов с использованием высокопроизводительных и параллельных вычислений и программы Gromacs.
17. Структура белков и способы ее визуализации с помощью молекулярных редакторов на компьютере.
18. Моделирование и оптимизация структуры биомолекул с помощью компьютерных программ.
19. Методы молекулярного докинга и молекулярной динамики и их использование при создании лекарственных препаратов.
20. Методы молекулярного докинга. Программа геометрического докинга GRAMM.
21. Докинг с конформационно подвижным лигандом с помощью программы Autodock 4.2.
22. Современные компьютерные методы конструирования противовирусных препаратов с использованием вирусных белков-мишеней.
23. Современные компьютерные методы конструирования противоопухолевых препаратов.

24. Дизайн лекарственных препаратов на основе структуры известного активного соединения.
25. Дизайн лекарственных препаратов на основе известного белка-мишени.
26. Возможности и ограничения методов компьютерного моделирования при конструировании лекарственных препаратов.
27. Использование высокопроизводительных вычислений для симуляции биомолекул в реалистичных биохимически условиях
28. Моделирование структуры биополимеров и их комплексов
29. Моделирование структуры белков-мишеней
30. Методы молекулярного докинга белок-лиганд с помощью программы Autodock
31. Методы молекулярного докинга белок-белок с помощью программы GRAMM
32. дизайн потенциальных ингибиторов вирусных белков
33. Методы молекулярного докинга белок-белок с помощью интернет-серверов
34. Молекулярный докинг ионных каналов с пептидами и низкомолекулярными лигандами для поиска и дизайна потенциальных модуляторов
35. Молекулярный докинг рецепторов с пептидами и низкомолекулярными лигандами для поиска и дизайна потенциальных модуляторов

Образцы экзаменационных билетов

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

«Дальневосточный федеральный университет»

Школа естественных наук

ООП 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Дисциплина «**Основы компьютерного моделирования**»

Форма обучения очная

Семестр 9 _____ учебного года

Реализующая кафедра: Биоорганической химии и биотехнологии

Экзаменационный билет № 1

1. Структура белков и способы ее визуализации с помощью молекулярных редакторов на компьютере
2. Базы данных NCBI (Pubmed, PubChem, PubBioassay и др.).

3. Методы молекулярного докинга. Программа геометрического докинга GRAMM.

Зав. кафедрой _____

М.П.

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение

высшего образования

«Дальневосточный федеральный университет»

Школа естественных наук

ООП 04.05.01- Фундаментальная и прикладная химия

Дисциплина «**Основы компьютерного моделирования**»

Форма обучения очная

Семестр 9 _____ учебного года

Реализующая кафедра: Биоорганической химии и биотехнологии

Экзаменационный билет № 2

1. Дизайн лекарственных препаратов на основе известного белка-мишени.
2. Кембриджская база рентгеноструктурных данных низкомолекулярных соединений.
3. Докинг с конформационно подвижным лигандом с помощью программы Autodock.

Зав. кафедрой _____

М.П.

Критерии выставления оценки студенту на экзамене по дисциплине

«Основы компьютерного моделирования»

Оценка «Отлично»

1. Дан полный и правильный ответ на основе изученных теорий.
2. Материал понят и изучен.
3. Материал изложен в определенной логической последовательности, литературным языком.
4. Ответ самостоятельный.

Оценка «Хорошо»

1, 2, 3, 4 – аналогично отметке «Отлично».

5. Допущены 2-3 незначительные ошибки, исправленные по требованию преподавателя, наблюдалась «шероховатость» в изложении материала.

Оценка «Удовлетворительно»

1. Учебный материал, в основном, изложен полно, но при этом допущены 1-2 существенные ошибки (например, неумение применять законы и теории к объяснению новых фактов).

2. Ответ неполный, хотя и соответствует требуемой глубине, построен несвязно.

Оценка «Неудовлетворительно»

1. Незнание или непонимание большей или наиболее существенной части учебного материала.

2. Допущены существенные ошибки, которые не исправляются после уточняющих вопросов, материал изложен несвязно.

Текущая аттестация

Текущая аттестация студентов по дисциплине «Основы компьютерного моделирования» проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной. Текущая аттестация проводится в форме контрольных мероприятий (УО-1, ПР-6) (ответы на вопросы на практических занятиях; выполнение практических работ) по оцениванию фактических результатов обучения студентов и осуществляется ведущим преподавателем.

Вопросы для самостоятельной подготовки к собеседованию по темам практических работ

1. Где хранится информация о последовательностях генов и белков, в каком формате?
2. Какой формат записей в Protein Data Bank?
3. Инструменты извлечения информации из биоинформатических банков данных?
4. Какую информацию хранит OMIM?
5. Как можно найти информацию об аминокислотных заменах, связанных с развитием болезней?
6. Роль вычислительного эксперимента в постгеномной биологии и медицине.
7. Методы моделирования структуры биологических макромолекул.
8. Методы моделирования биохимических путей.

9. Моделирование молекулярной динамики, идейные основы и возможности компьютерной реализации.
10. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярных взаимодействий. Общая схема молекулярно-динамического вычислительного эксперимента.
11. Молекулярная динамика белков.
12. Примеры постановка вычислительных экспериментов.
13. Визуализация траекторий молекулярной динамики.
14. Моделирование силового разворачивания белковой глобулы.
15. Какие представления лежат в основе моделирования тепловой подвижности атомарных систем методом молекулярной динамики?
16. Когда и для каких молекулярных систем были проведены первые вычислительные эксперименты с применением метода молекулярной динамики?
17. Какие программные комплексы для моделирования молекулярной динамики биомолекулярных систем наиболее распространены в настоящее время?
18. Приведите характерные величины пространственных, временных и энергетических масштабов, возникающих при описании молекулярных систем.

Критерий оценки

I. Устный ответ

100-85 баллов - если ответ показывает прочные знания основных процессов изучаемой предметной области, отличается глубиной и полнотой раскрытия темы; владение терминологическим аппаратом; умение объяснять сущность, явлений, процессов, событий, делать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы, приводить примеры; свободное владение монологической речью, логичность и последовательность ответа; умение приводить примеры современных проблем изучаемой области.

85-76 - баллов - ответ, обнаруживающий прочные знания основных процессов изучаемой предметной области, отличается глубиной и полнотой раскрытия темы; владение терминологическим аппаратом; умение объяснять сущность, явлений, процессов, событий, делать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы, приводить примеры; свободное владение монологической речью, логичность и последовательность ответа. Однако допускается одна - две неточности в ответе.

75-61 - балл - оценивается ответ, свидетельствующий в основном о знании процессов изучаемой предметной области, отличающийся недостаточной глубиной и полнотой раскрытия темы; знанием основных вопросов теории;

слабо сформированными навыками анализа явлений, процессов, недостаточным умением давать аргументированные ответы и приводить примеры; недостаточно свободным владением монологической речью, логичностью и последовательностью ответа. Допускается несколько ошибок в содержании ответа; неумение привести пример развития ситуации, провести связь с другими аспектами изучаемой области.

60-50 баллов - ответ, обнаруживающий незнание процессов изучаемой предметной области, отличающийся неглубоким раскрытием темы; незнанием основных вопросов теории, несформированными навыками анализа явлений, процессов; неумением давать аргументированные ответы, слабым владением монологической речью, отсутствием логичности и последовательности. Допускаются серьезные ошибки в содержании ответа; незнание современной проблематики изучаемой области.