

## «КОМП'ЮТЕРНИЙ АНАЛІЗ БІОМОЛЕКУЛ».

**Мета** полягає в освоєнні теоретичної бази методів комп'ютерного моделювання структури біологічних молекул, до яких відносяться методи обчислювання електронної структури молекул – методи квантової хімії; методи молекулярної механіки або методи силових полів, що дозволяють проводити конформаційний аналіз просторової структури біополімерів та їх компонентів; методи Монте Карло, молекулярного докінгу та молекулярної динаміки; методи аналізу співвідносин структура – біологічна активність та сучасного програмного забезпечення реалізації перелікованих методів за допомогою сучасних комп'ютерних технологій.

**Завдання курсу:** дати необхідний обсяг знань в області комп'ютерного моделювання у галузі молекулярної біофізики з метою їх застосування при дослідженні структури біологічних макромолекул та взаємодій між ними на атомно-молекулярному рівні.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

**знати:** основні принципи структурної організації біологічних макромолекул; основні фізичні принципи методів комп'ютерного моделювання; сучасне програмне забезпечення для реалізації методів комп'ютерного моделювання.

**вміти:** виконувати розрахунки електронної структури компонентів біологічних молекул методами квантової хімії; проводити конформаційний аналіз фрагментів білків та нуклеїнових кислот; виконувати моделювання систем біомолекула-розчинник методами Монте-Карло та молекулярної динаміки з використанням програмного пакету HyperChem 7.0.

### Базова

1. Кларк Т. Компьютерная химия, М., Мир, 1990
2. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Высшая школа, Москва, 1979
3. Хобза Р., Заградник Г. Межмолекулярные комплексы. М., Мир, 1989
4. Буркет У., Эллинджер Н. Молекулярная механика. М., Мир, 1986
5. Дашевский В.Г. Конформационный анализ макромолекул. М., Наука, 1987
6. В.М.Замалин, Г.Э.Норман, В.С.Филинов. Метод Монте Карло в статистической термодинамике, Наука, М., 1977
7. TamarSchlick. MolecularModelingandSimulation. An Interdisciplinary Guide. 2nd edition. Springer Science+Business Media, LLC 2010, 723 p. - [http://ebookey.org/Molecular-Modeling-and-Simulation-An-Interdisciplinary-Guide-2-Edition\\_832412.html](http://ebookey.org/Molecular-Modeling-and-Simulation-An-Interdisciplinary-Guide-2-Edition_832412.html)

### Допоміжна

1. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот, М., Мир, 1987
2. Шульц, Штимлер Принципы структурной организации белков, М., Мир, 1982
3. Теория межмолекулярных взаимодействий: от двухатомных молекул до биополимеров, под ред. А. и Б. Пульман, М., Мир, 1979

4. Полозов Р.В. Метод полуэмпирического силового поля в конформационном анализе биополимеров. М., Наука, 1981
5. Методы Монте Карло в статистической физике. Под ред. Биндера К., М., Мир, 1982
6. Хохлов А.Р., Рабинович А.Л., Иванов В.А. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. 2009. 696 с.

### **Інформаційні ресурси**

Шайтан К.В., Сарайкин С.С. Молекулярная динамика, 1999

<http://www.library.biophys.msu.ru/MolDyn/>

FrenkelDaan, SmitBerend. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. ACADEMIC PRESS: Copyright ? 2002, 1996 by ACADEMIC PRESS.

<http://www.coffor.com/physics-of-molecules/library/books/frenkel-smit.djvu>