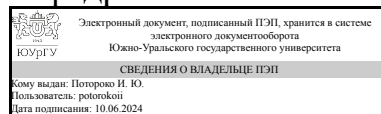


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей
кафедрой



И. Ю. Потороко

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.М0.05 Молекулярное моделирование биотехнологических процессов

для направления 19.04.01 Биотехнология

уровень Магистратура

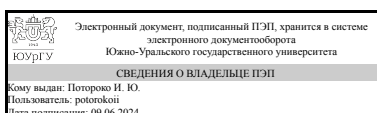
магистерская программа Индустриальная и экологическая биотехнология

форма обучения очная

кафедра-разработчик Пищевые и биотехнологии

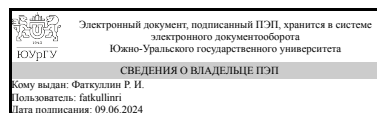
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 19.04.01 Биотехнология, утверждённым приказом Минобрнауки от 10.08.2021 № 737

Зав.кафедрой разработчика,
д.техн.н., проф.



И. Ю. Потороко

Разработчик программы,
к.техн.н., доцент



Р. И. Фаткуллин

1. Цели и задачи дисциплины

Формирование у студентов комплексного системного представления о молекулярном моделировании биомолекул и прикладных аспектах использования этой технологии для решения профессиональных задач. Д Задачи изучения учебной дисциплины:

- формирование представлений об основных алгоритмов, используемых при молекулярном моделировании
- знакомство с основными методами компьютерного моделирования пространственной структуры молекул и подходами к их решению;
- знакомство с основными методами виртуального скрининга баз данных химических соединений;
- Формирование представлений о базовых приемах компьютерного дизайна мишень-ориентированных комплексов

Краткое содержание дисциплины

Дисциплина содержит теоретические сведения по молекулярному моделированию, а также описание методов и алгоритмов, баз данных, форматов файлов, используемых при молекулярном моделировании биомолекул.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-5 Способен моделировать развитие биотехнологических процессов в природе	Знает: Методологию и принцип молекулярного моделирования биообъектов и биотехнологических процессов Умеет: Решать прикладные задачи и реализовать проекты в области молекулярного моделирования в промышленных и экологических биотехнологиях Имеет практический опыт: Молекулярного моделирования на основе специализированных программ и биоинформационного анализа

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Нет	Индустриальная биобезопасность для устойчивых экосистем, Диагностические тест-системы для контроля экобезопасности

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Нет

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 ч., 56,5 ч. контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам
		в часах
		Номер семестра
		1
Общая трудоёмкость дисциплины	108	108
<i>Аудиторные занятия:</i>	48	48
Лекции (Л)	16	16
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	32	32
Лабораторные работы (ЛР)	0	0
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	51,5	51,5
Подготовка и представление отчетов по практическим работам	13	13
Работа с конспектами лекций и научной литературой	22,5	22,5
Подготовка к текущим контрольным мероприятиям и промежуточной аттестации	16	16
Консультации и промежуточная аттестация	8,5	8,5
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Введение в дисциплину	2	2	0	0
2	Структура молекул и силовые поля. Молекулярная механика	6	2	4	0
3	Молекулярная динамика в расчетах биомолекул. Основные понятия и алгоритмы молекулярной динамики.	8	4	4	0
4	Основы моделирования малых молекул	7	3	4	0
5	Основы моделирования больших молекул	11	3	8	0
6	Молекулярный дизайн комплексов молекул. Поиск новых биоактивных молекул и химоинформатика	14	2	12	0

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	1	Понятие о молекулярном моделировании. История и этапы развития молекулярного моделирования. Глоссарий дисциплины: основные термины и понятия, единицы измерения. Области применения молекулярного моделирования.	2
2	2	Основы молекулярной механики. Структура молекул. Атомные заряды и основные представления о силовых полях. Ковалентные и не ковалентные (ван-дер-ваальсовы и кулоновские силы) взаимодействия.	2
3	3	Динамика молекулярных систем. Простые модели и алгоритмы, динамика с ограничениями, учет растворителя. Основные конформационные изменения.	2

4	3	Расчеты молекулярной динамики методами интегрирования. Методы Монте-Карло и их использование в молекулярном моделировании.	2
5	4	Основы моделирования малых молекул. Силовые поля для малых молекул. Конформационный анализ, минимизация энергии, поиск локальным минимумов	3
6	5	Основы моделирования больших молекул. Структурные данные и основа построения молекул белка. Методы предсказания структуры из первых принципов. Сравнительное моделирование. Построение и развитие модели.	3
6	6	Молекулярный дизайн комплексов молекул. Молекулярные дескрипторы. Количественное описание структура-активность.	1
7	6	Методология QSAR моделирования и основные алгоритмы (MoS, Altel) в молекулярном моделировании и предсказании свойств молекулярных комплексов. Программное обеспечение, базы данных.	1

5.2. Практические занятия, семинары

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание практического занятия, семинара	Кол-во часов
1	2	Описание электронной структуры молекул. Типы файлов, используемые для компьютерного описания моделей: SMILES, SMARTS. Работа с базами данных молекулярных структур.	4
2	3	Моделирование молекулярной динамики. Пространственное моделирование молекул	4
3	4	Работа с программами визуализации молекул	4
4	5	Моделирование структуры белка. Самосборка и денатурация структуры белка.	4
5	5	Молекулярное моделирование для предсказания структуры белка.	4
6	6	Методы и дескрипторы молекулярного моделирования: топологические, геометрические, квантовые. Молекулярный докинг	4
7	6	Анализ экстерiorsа и интерiorsа молекул. Принципы комплементарности в алгоритмах BiS и CiS	4
8	6	Создание псевдоатомной модели. Анализ взаимосвязи биологической активности и характеристик взаимодействий в системе "псевдо-рецептор - лиганд"	4

5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС			
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Семестр	Кол-во часов
Подготовка и представление отчетов по практическим работам	Барташевич, Е. В. Стереохимия и симметрия молекул [Текст] учеб. пособие для бакалавров по направлению 020100 "Химия" Е. В. Барташевич, Д. К. Никулов ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Хим. фак.; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2011. - 72, [1] с. электрон. версия	1	13

	Баскин, И. И. Введение в хемоинформатику [Текст] Ч. 5 Информатика химических реакций в 5 ч. И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т. - Казань: Издательство Казанского университета, 2017. - 242 с. ил.		
Работа с конспектами лекций и научной литературой	Молекулярное моделирование: теория и практика : учебное пособие / Х. -. Хёльте, В. Зиппл, Д. Роньян, Г. Фолькерс ; перевод с английского А. А. Олиференко [и др.]. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 322 с. — ISBN 978-5-00101-724-0. Уилсон, К. Принципы и методы биохимии и молекулярной биологии. [Электронный ресурс] / К. Уилсон, Д. Уолкер. - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. - 855 с. Слэтер, Д. Электронная структура молекул [Текст] пер. с англ. Д. Слэтер ; под ред. Д. А. Бочвара. - М.: Мир, 1965. - 587 с. черт. Баскин, И. И. Введение в хемоинформатику [Текст] Ч. 5 Информатика химических реакций в 5 ч. И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т. - Казань: Издательство Казанского университета, 2017. - 242 с. ил Барташевич, Е. В. Стереохимия и симметрия молекул [Текст] учеб. пособие для бакалавров по направлению 020100 "Химия" Е. В. Барташевич, Д. К. Никулов ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Хим. фак.; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2011. - 72, [1] с. электрон. версия	1	22,5
Подготовка к текущим контрольным мероприятиям и промежуточной аттестации	Молекулярное моделирование: теория и практика : учебное пособие / Х. -. Хёльте, В. Зиппл, Д. Роньян, Г. Фолькерс ; перевод с английского А. А. Олиференко [и др.]. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 322 с. — ISBN 978-5-00101-724-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. Баскин, И. И. Введение в хемоинформатику [Текст] Ч. 5 Информатика химических реакций в 5 ч. И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т. - Казань: Издательство Казанского университета, 2017. - 242 с. ил. Кларк, Т. Компьютерная химия [Текст] практ. руководство по расчетам структуры и энергии молекулы Т. Кларк ; пер. с англ. А. А. Коркина ; под ред. В. С. Мاستрюкова, Ю. Н. Панченко. - М.: Мир, 1990. - 384 с. ил. Цирельсон, В.	1	16

	Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. ил., [12] л. цв. ил.; табл. Эткинс, П. Молекулы [Текст] П. Эткинс ; пер. с англ. А. А. Кирюшкина. - М.: Мир, 1991. - 215 с. ил. Барташевич, Е. В. Стереохимия и симметрия молекул [Текст] учеб. пособие для бакалавров по направлению 020100 "Химия" Е. В. Барташевич, Д. К. Никулов ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Хим. фак.; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2011. - 72, [1] с. электрон. версия Флайгер, У. Строение и динамика молекул Т. 1 В 2-х т. Пер. с англ. под ред. М. А. Ельяшевича. - М.: Мир, 1982. - 407 с. ил.		
--	---	--	--

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	1	Текущий контроль	Защита отчетов по практическим работам	0,2	100	По результатам защиты отчетов о выполнении практических работ (1-4 темы) обучающийся может максимально набрать 100 баллов с учетом следующих критериев: 1. Логичность и последовательность в изложении материала 0-10 баллов 2. Объем сформированного материала 0-20 баллов 3. Уровень анализа полученных результатов 0-10 баллов 4. Умение формировать отчет по проделанной работе 0-10 баллов 5. Правильность оформления (соответствие стандарту, структурная упорядоченность, ссылки, цитаты, таблицы и т.д.) 0-10 баллов 6. Соблюдение объема, шрифтов, интервалов (соответствие оформления правилам компьютерного набора	экзамен

						текста) 0-10 баллов 7. Качество представленного в отчете иллюстративно-графического материала 0-10 баллов 8 Полнота и информативность полученных выводов, их соответствие поставленным задачам 0-10 баллов 9. Умение работать в команде 0-10 баллов	
2	1	Текущий контроль	Отчет по практическим занятиям (темы 5-8)	0,2	100	По результатам защиты отчетов о выполнении практических работ (1-4 темы) обучающийся может максимально набрать 100 баллов с учетом следующих критериев: 1. Логичность и последовательность в изложении материала 0-10 баллов 2. Объем сформированного материала 0-20 баллов 3. Уровень анализа полученных результатов 0-10 баллов 4. Умение формировать отчет по проделанной работе 0-10 баллов 5. Правильность оформления (соответствие стандарту, структурная упорядоченность, ссылки, цитаты, таблицы и т.д.) 0-10 баллов 6. Соблюдение объема, шрифтов, интервалов (соответствие оформления правилам компьютерного набора текста) 0-10 баллов 7. Качество представленного в отчете иллюстративно-графического материала 0-10 баллов 8 Полнота и информативность полученных выводов, их соответствие поставленным задачам 0-10 баллов 9. Умение работать в команде 0-10 баллов	экзамен
3	1	Текущий контроль	Подготовка презентации по теоретическому курсу	0,2	100	Раскрытие проблемы - 0-20 баллов Представление - 0-20 баллов Оформление 0-20 баллов Ответы на вопросы 0-20 баллов	экзамен
4	1	Промежуточная аттестация	Экзамен	-	100	Знания, умения и навыки обучающихся при промежуточной аттестации в форме экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». «Отлично» – Ответы на поставленные в билете вопросы и дополнительные вопросы излагаются логично, последовательно и не требуют дополнительных пояснений. Демонстрируются глубокие	экзамен

					профильные знания по специальности. Ответ полный, самостоятельный, выводы обоснованы. «Хорошо» – Ответы на поставленные в билете вопросы и дополнительные вопросы излагаются систематизировано и последовательно. Демонстрируется умение анализировать материал, однако не все выводы носят аргументированный и доказательный характер. Материал излагается уверенно, в основном правильно даны все определения и понятия. Допущены небольшие неточности при выводах и использовании терминов. «Удовлетворительно» – Допускаются нарушения в последовательности изложения при ответе. Демонстрируются поверхностные знания профильных дисциплин. Имеются затруднения с выводами. Определения и понятия даны не чётко. «Неудовлетворительно» – Материал излагается непоследовательно, сбивчиво, не представляет определенной системы знаний. Не даны ответы на дополнительные вопросы комиссии. Допущены грубые ошибки в определениях и понятиях.	
--	--	--	--	--	---	--

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Не предусмотрены

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ			
		1	2	3	4
ПК-5	Знает: Методологию и принцип молекулярного моделирования биообъектов и биотехнологических процессов	+	+	+	+
ПК-5	Умеет: Решать прикладные задачи и реализовать проекты в области молекулярного моделирования в промышленных и экологических биотехнологиях	+	+		+
ПК-5	Имеет практический опыт: Молекулярного моделирования на основе специализированных программ и биоинформационного анализа				+

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Практикум на ЭВМ [Текст] Ч. 1 метод. указания к лаб. работам Е. В. Аксенова, Н. С. Силкина, М. Л. Цымблер ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Систем. программирование ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2009. - 70, [1] с. ил. электрон. версия

б) дополнительная литература:

1. Кларк, Т. Компьютерная химия [Текст] практ. руководство по расчетам структуры и энергии молекулы Т. Кларк ; пер. с англ. А. А. Коркина ; под ред. В. С. Мاستрюкова, Ю. Н. Панченко. - М.: Мир, 1990. - 384 с. ил.
2. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. ил., [12] л. цв. ил.; табл.
3. Эткинс, П. Молекулы [Текст] П. Эткинс ; пер. с англ. А. А. Кирюшкина. - М.: Мир, 1991. - 215 с. ил.
4. Барташевич, Е. В. Стереохимия и симметрия молекул [Текст] учеб. пособие для бакалавров по направлению 020100 "Химия" Е. В. Барташевич, Д. К. Никулов ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Хим. фак.; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2011. - 72, [1] с. электрон. версия
5. Флайгер, У. Строение и динамика молекул Т. 1 В 2-х т. Пер. с англ. под ред. М. А. Ельяшевича. - М.: Мир, 1982. - 407 с. ил.

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

1. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Вычислительная математика и информатика»

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. МП_СРС

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. МП_СРС

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Молекулярное моделирование: теория и практика : учебное пособие / Х. -. Хельтзе, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс ; перевод с английского А. А. Олиференко [и др.]. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 322 с. — ISBN 978-5-00101-724-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/151560
2	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Уилсон, К. Принципы и методы биохимии и молекулярной биологии. [Электронный ресурс] / К. Уилсон, Д. Уолкер. - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. - 855 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/66244
3	Основная	Электронно-	Юрчук, С. Ю. Компьютерное моделирование нанотехнологий,

литература	библиотечная система издательства Лань	наноматериалов и наноструктур: моделирование наносистем методами молекулярной динамики : учебное пособие / С. Ю. Юрчук. — Москва : МИСИС, 2013. — 47 с. — ISBN 978-5-87623-663-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — https://e.lanbook.com/book/116642
------------	---	--

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Windows(бессрочно)
2. Microsoft-Office(бессрочно)
3. -Modelio(бессрочно)
4. -Python(бессрочно)
5. Avogadro Chemistry-Avogadro: Molecular Editor and Visualization(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. ООО "ГарантУралСервис"-Гарант(31.12.2022)
2. -The Cambridge Crystallographic Data Centre(31.12.2023)
3. EBSCO Information Services-EBSCOhost Research Databases(28.02.2017)

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Лекции	263 (2)	Мультимедийная учебная аудитория Материально-техническое обеспечение: 1. Проектор – 1 шт. 2. Экран – 1 шт. 3. Ноутбук – 1 шт. Имущество: 1. Учебная парта двухместная – 20 шт. 2. Учебная парта четырехместная – 10 шт. 3. Доска с рабочими поверхностями – 1 шт. 4. Стол преподавателя – 1 шт.
Практические занятия и семинары	264 (2)	Учебная аудитория Материально-техническое обеспечение: 1. Проектор – 1 шт. 2. Экран – 1 шт. 3. Монитор – 1 шт. 4. Клавиатура – 1 шт. 5. Мышь компьютерная – 1 шт. 6. Блок системный – 1шт. Имущество: 1. Стол учебный двухместный – 15 шт. 2. Стул – 30 шт. 3. Доска меловая – 1 шт. 4. Стол преподавателя – 1 шт. 5. Стул преподавателя – 1 шт. 6. Шкаф двухстворчатый – 1 шт. 7. Шкаф одностворчатый – 1 шт. 8. Кафедра-стойка – 1 шт.