

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

Структурная биоинформатика: Alfafold3

Наименование модулей, разделов (дисциплин) и тем	Содержание обучения (по темам в дидактических единицах), наименование и тематика лабораторных работ, практических занятий (семинаров), самостоятельной работы, используемых образовательных технологий и рекомендуемой литературы	Лектор/ инструктор	Комментарий
Рабочая программа к Модулю 1. Общая компьютерная грамотность (10 академ. часов: 4 семинара и 2 лекция по 4 академ. часа)			
Раздел 1.1. Вступительная лекция "Поиск и конструирование новых лекарств с применением методов in silico"		Поройков В.В.	
Раздел 1.2. Вводное занятие: проверка подключения и средств связи. Приветственное слово.		Инструктор	
Раздел 1.3. Платформа аренды вычислительных мощностей Yandex Cloud. Основы, достоинства, недостатки		Инструктор	

Раздел 1.4. Основы удаленного доступа: протоколы RDP и SSH	Инструктор	
Раздел 1.5. Передача файлов на удаленные машины: протоколы SFTP и SCP, утилита winSCP	Инструктор	
Раздел 1.6. Коллоквиум: опрос комбинированный по пройденному материалу	Инструктор	
Рабочая программа к Модулю 2. Alpha Fold3 (12 академ. часов: 4 семинара и 2 лекции по 2 академ. часа)		
Раздел 2.1. Экспериментальное определение структуры белка. База данных PDB. Предсказание структуры белка in silico. Modeller, Swiss-Model, Rosetta, AlphaFold	Веселовский А.В.	
Раздел 2.2. Визуализация молекул, функционал приложений: PyMol, VMD	Инструктор	
Раздел 2.3. Базовые принципы AlphaFold3	Веселовский А.В.	
Раздел 2.4. AlphaFold3. Прорыв в структурной биоинформатике благодаря нейронным сетям. Принципы работы. Оценка качества моделирования. Сравнение с PDB	Инструктор	

Раздел 2.5. Возможности AlphaFold3 в области моделирования комплексов белок-лиганд (белок, нуклеиновые кислоты и низкомолекулярные соединения)	Инструктор	
Раздел 2.6. Коллоквиум: опрос комбинированный по пройденному материалу	Инструктор	
Рабочая программа к Модулю 3. Молекулярная динамика (16 академ. часов: 4 семинара и 4 лекция по 2 академ. часа)	Инструктор	
Раздел 3.1. Молекулярная механика. Поля сил.	Веселовский А.В.	
Раздел 3.2. Молекулярный докинг.	Веселовский А.В.	
Раздел 3.3 Моделирование комплекса белок-низкомолекулярный лиганд и белок-белкового комплекса методом докинга		
Раздел 3.4. Сущность молекулярной динамики. Программы моделирования молекулярной динамики (Amber, Gromacs, NAMD, CHARMM)	Веселовский А.В.	
Раздел 3.5. Молекулярное моделирование. Молекулярная динамика. Применение методов молекулярной динамики в пакете GROMACS (Amber)	Инструктор	
Раздел 3.6. Молекулярная динамика белок-лигандного комплекса	Инструктор	

Раздел 3.7. Интерпретация результатов и основы статистического обработки.	Инструктор	
Раздел 3.8. Консультация перед экзаменом	Инструктор	

