

Министерство образования и науки Российской Федерации
Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова
Кафедра органической и биологической химии

**КОМПЬЮТЕРНОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ
МАКРОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ОБЪЕКТОВ
И БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Методические указания

*Рекомендовано
Научно-методическим советом университета для студентов,
обучающихся по направлению Биология*

Ярославль
ЯрГУ
2013

УДК 577.2:004.9(072)
ББК 3973.2я73+Е070я73
К 63

*Рекомендовано
Редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного издания. План 2013 года.*

Рецензент
кафедра органической и биологической химии ЯрГУ

Составители:
Д. А. Базлов, А. В. Цивов

Компьютерное моделирование макромолекулярных объектов и биологических систем: метод. указания / сост. Д. А. Базлов, А. В. Цивов; Яросл. гос. ун-т им. П. Г. Демидова. — Ярославль : ЯрГУ, 2013. — 48 с.

Методические указания знакомят студентов-биологов с основами такого направления, как биоинформатика, и вычислительными методами для обработки экспериментальных данных, моделирования биологических и биохимических объектов.

Предназначены для студентов, обучающихся по направлению 020400.62 Биология (дисциплины «Молекулярное моделирование механизмов жизнедеятельности»; «Молекулярная биология и компьютерное моделирование биосистем», цикл Б2), очной формы обучения.

УДК 577.2:004.9(072)
ББК 3973.2я73+Е070я73

© ЯрГУ, 2013

Оглавление

1. <i>Биоинформатика</i>	3
1.1. Развитие биоинформатики.....	3
1.2. In silico или in vivo?.....	6
1.3. Цели и задачи биоинформатики.....	7
1.4. Основные направления биоинформатики.....	9
1.5. Биоинформатика последовательностей.....	9
1.6 Структурная биоинформатика.....	11
1.7. Компьютерная геномика.....	13
2. <i>Виды межмолекулярных взаимодействий</i>	15
2.1. Молекулярное узнавание. Механизмы узнавания.....	15
2.2. Гидрофобные взаимодействия.....	21
2.3. Стэкинг-взаимодействия.....	24
2.4. Межмолекулярные взаимодействия.....	26
2.5 Оценка энергии межмолекулярного взаимодействия.....	29
2.6. Оценка Ван-дер-ваальсовых атомных радиусов.....	29
2.7. Водородная связь.....	30
3. <i>Способы прогнозирования и моделирования структуры и свойств вещества</i>	32
3.1. Молекулярное моделирование	32
3.2. Создание компьютерной модели молекул.....	33
3.3. Описание модели квантово-химическими расчетами. Молекулярная механика и динамика.....	35
3.4. Квантово-химические методы расчета.....	39
<i>Контрольные вопросы</i>	44
<i>Литература</i>	46