

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 макромолекуляр-
К 63 ных объектов и биологических систем:** метод. указа-
ния / сост. Д. А. Базлов, А. В. Цивов; Яросл. гос. ун-т
им. П. Г. Демидова. — Ярославль : ЯрГУ, 2013. — 48 с.

Методические указания знакомят студентов-биоло-
гов с основами такого направления, как биоинформа-
тика, и вычислительными методами для обработки экс-
периментальных данных, моделирования биологических
и биохимических объектов.

Предназначены для студентов, обучающихся по на-
правлению 020400.62 Биология (дисциплины «Молеку-
лярное моделирование механизмов жизнедеятельности»;
«Молекулярная биология и компьютерное моделирова-
ние биосистем», цикл Б2), очной формы обучения.

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

© ЯрГУ, 2013

Оглавление

| | |
|---|----|
| 1. Биоинформатика..... | 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. Виды межмолекулярных взаимодействий..... | 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. Способы прогнозирования и моделирования структуры и свойств вещества..... | 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 |
| Контрольные вопросы..... | 44 |
| Литература..... | 46 |