

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт белка
Российской академии наук

ПРИНЯТО Ученым советом ИБ РАН

Протокол № 6 от 08.06.2024 г.

Зам. директора ИБ РАН



Д. х. н. А. Д. Никулин

Направление подготовки 06.06.01 – Биологические науки

Рабочая программа по дисциплине

**«КОМПЬЮТЕРНЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ
МАКРОМОЛЕКУЛ»**

Составитель курса:

кандидат биологических наук

О. С. Никонов

Пущино 2024

1. Цель изучения дисциплины

Цель преподавания дисциплины "Компьютерные методы исследования макромолекул" состоит в содействии формированию следующих компетенций:

Общепрофессиональными компетенциями:

- способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1).

Профессиональными компетенциями:

- готовность самостоятельно и творчески использовать современные компьютерные технологии для решения научно-исследовательских задач профессиональной деятельности (ПК-3);

- готовность к практическому использованию полученных научных результатов при самостоятельном проведении научно-исследовательской работы и получению научных результатов (ПК-4);

Универсальными компетенциями:

- способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);

- готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4).

2. Основные задачи курса

Курс "Компьютерные методы исследования макромолекул" составной частью образовательной программы аспирантуры по направлению подготовки 06.06.01 «Биологические науки». Курс рассчитан на аспирантов, специализирующихся в области молекулярной биологии, и научных сотрудников, начинающих работать в этой области.

Умение пользоваться компьютером и прикладными программами при проведении научных исследований является современным требованием ко всем специалистам, работающим практически в любой области молекулярной биологии, биохимии и биофизики.

В настоящее время невозможно проводить исследования белков и нуклеиновых кислот без использования накопленных обширных знаний в области молекулярной биологии и биохимии, которые сведены в базы данных. Доступ к большинству баз данных организован по принципу клиент-сервер через Интернет. Современный специалист должен уметь производить поиск необходимых данных, уметь работать с ними (как правило, с использованием программ на компьютере), а также уметь публиковать полученные результаты в базах данных и научных статьях. Анализ и обработка большого объема данных, сравнение и анализ первичных и пространственных структур белков и нуклеиновых кислот, решение других аналогичных задач требуют хорошего владения современным программным обеспечением. Публикации в журналах также оформляются с использованием компьютерных программ, как для создания и обработки изображений, так и средств работы с текстом. Более того, для внятного донесения информации до научной общественности в рамках симпозиумов и конференций необходимо обладать навыками создания презентаций и постеров, что подразумевает умение не только грамотно использовать соответствующие программные пакеты, но и обладать базовыми знаниями в области верстки и дизайна. Кроме того, некоторые вычислительные методы непосредственно используются в самой научной экспериментальной работе. Например, при проведении молекулярно-динамических расчётов и/или при уточнении структур макромолекул. Для грамотного применения вычислительного потенциала при решении подобных задач необходимо не только знать непосредственно инструментарий конкретных программных пакетов, но и понимать физические и химические

основы моделируемых процессов и принципы используемого для этих целей математического аппарата.

Таким образом, работа современного специалиста в области молекулярной биологии и биохимии требует навыков работы с компьютером в достаточно широкой области.

Курс "Компьютерные методы исследования макромолекул" связан с рядом других курсов специализаций по молекулярной биологии:

"Физические методы в молекулярной биологии";

"Принципы структурной организации белков и нуклеиновых кислот";

"Физика белка"

Прохождение курса предполагает выполнение лабораторных работ по изучению существующих баз данных и их использованию, применению программ в работе с полученными данными.

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины "Компьютерные методы исследования макромолекул" формируются следующие компетенции:

1. Общепрофессиональные компетенции:

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий.

2. Универсальные компетенции:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе и междисциплинарных областях;

- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач.

3. Профессиональные компетенции:

- готовностью к организации и проведению на современном уровне научных исследований в профессиональной области;

-готовность самостоятельно и творчески использовать современные компьютерные технологии для решения научно-исследовательских задач профессиональной деятельности;

-готовность к практическому использованию полученных научных результатов.

В результате освоения дисциплины "Компьютерные методы исследования макромолекул" аспирант должен:

Знать:

- современные актуальные направления и арсенал методов и подходов в избранной профессиональной области и смежных областях биологических наук;

- исчерпывающую характеристику объектов и методов по теме исследования;

- методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;

- особенности представления результатов научной деятельности в устной и письменной форме при работе в российских и международных исследовательских коллективах.

Уметь:

- критически анализировать и оценивать основные концепции и синтезировать новые идеи в избранной профессиональной области и междисциплинарных направлениях;

- обсуждать полученные собственные результаты в профессиональной и междисциплинарной аудитории, в том числе международной;

- следовать нормам, принятым в научном общении при работе в российских и международных исследовательских коллективах с целью решения научных и научно-образовательных задач;
- осуществлять личностный выбор в процессе работы в российских и международных исследовательских коллективах, оценивать последствия принятого решения и нести за него ответственность перед собой, коллегами и обществом;
- критически анализировать и оценивать основные концепции и синтезировать новые идеи в избранной профессиональной области и междисциплинарных направлениях;
- обсуждать полученные собственные результаты в профессиональной и междисциплинарной аудитории, в том числе международной.

Владеть:

- навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;
- навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;
- навыками анализа основных мировоззренческих и методологических проблем, в.т.ч. междисциплинарного характера, возникающих при работе по решению научных и научно-образовательных задач в российских или международных исследовательских коллективах;
- технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований;
- технологиями планирования деятельности в рамках работы в российских и международных коллективах по решению научных и научно-образовательных задач
- системным пониманием актуальных проблем методологического арсенала биологических наук;
- системным пониманием перспектив развития и социального значения избранной профессиональной области.

4. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Курс "Компьютерные методы исследования макромолекул" является вариативной частью блока Б1 и основополагающей для формирования знаний, умений и навыков (профессиональных компетенций) в научно-исследовательской деятельности в области биологических наук. Курс связан с рядом других курсов специализаций по молекулярной биологии:

"Физические методы в молекулярной биологии";

"Принципы структурной организации белков и нуклеиновых кислот";

"Физика белка"

Прохождение курса предполагает выполнение лабораторных работ по изучению существующих баз данных и их использованию, применению программ в работе с полученными данными.

5. Объем дисциплины

Общая трудоемкость курса – 2 ЗЕТ, из них лекции – 18 часов, лабораторные работы – 36 часа.

ПРОГРАММА

Введение.

История развития и применения компьютеров в научных исследованиях. Развитие Интернета, WWW, сбора и обмена информации посредством баз данных, доступных посредством инструментов Интернета. Знакомство с предстоящей программой обучения, обсуждение.

Базы данных в молекулярной биологии.

Биологические базы данных и их типы. Первичные и вторичные базы данных. Географическое расположение баз данных и их адреса в сети интернет. Таксономические базы данных. Нуклеотидные базы данных. Геномные базы данных. Базы данных по белкам. Базы данных структур биологических макромолекул. Методологические базы данных. Поиск баз данных.

Практическая часть: конструирование праймеров для получения генетических конструкций на основе информации, полученной с использованием нуклеотидных баз данных. Программа Gene Runner.

Мир РНК.

Классификация РНК, база данных Rfam основы математической статистики и синтаксического анализа, лежащие в её основе. Ковариации, ковариационные модели, скрытые марковские модели, грамматика и её термины, формальная грамматика, порождающая грамматика, типы грамматик по Хомскому, контекстно-свободные грамматики и стохастические контекстно-свободные грамматики. Вторичная структура РНК. Укладка 2D структуры РНК в 3D. Рибозимы. Рибосвитчи.

Практическая часть: предсказание вторичной структуры РНК, RNAfold webserver.

Работа с последовательностями белков.

Понятия гомологии и сходства. Поиск гомологии. Сравнение аминокислотных последовательностей. Матрицы аминокислотных замен и области их применения. Поиск частичной гомологии и множественные выравнивания аминокислотных последовательностей, инструментарий. Вторичные базы данных по белкам. Банк структур PDB. Создание модели белка методом гомологичного моделирования. Сервер и инструментарий SWISS-MODEL. Наложение структур белков.

Практическая часть: поиск белка по фрагменту аминокислотной последовательности при помощи программы BLAST (webserver), поиск гомологичных белков, поиск белковых структур (webserver UniProt, webserver PDB), выравнивание аминокислотных последовательностей (webserver T-COFFEE, webserver Clustal Omega), гомологичное моделирование белка с использованием структуры-шаблона (webserver SWISS-MODEL)

Основы статистической обработки данных.

Основные понятия и термины. Измерения. Точность измерения. Ошибки измерения, случайные и систематические. Промахи. Погрешность измерения. Пути уменьшения погрешности измерения. Виды погрешности. Представление погрешности. Доверительный интервал и доверительная вероятность. Функции распределения Гаусса и Пуассона. Коэффициенты Стьюдента.

Исследование взаимосвязи двух величин. Аппроксимация данных. Метод наименьших квадратов. Коэффициент корреляции.

Молекулярная динамика. Некоторые теоретические основы.

Классические уравнения движения. Законы Ньютона. Принцип относительности Галилея.

Эмпирические потенциалы межатомного взаимодействия. Потенциал Леннард-Джонса. Парные потенциалы взаимодействия. Многочастичные потенциалы взаимодействия, поля сил. Вода в молекулярной динамике. Термодинамические ансамбли NVE, NPT, NVT. Температура и термостатирование в молекулярной динамике. Давление и баростатирование в молекулярной динамике. Теорема о равнораспределении. Шаг интегрирования Δt . Сокращения времени на расчёт межатомных взаимодействий, параметр r_{cut} .

Основы практического применения метода молекулярной динамики на примере программного пакета GROMACS 2020. Простейшая симуляция.

3 этапа молекулярно-динамического эксперимента. «Пробоподготовка», рабочий поток для простейшего случая «белок в воде». Конвертация базовой структуры, подготовка топологии. Определение модельного бокса, задание граничных условий. Добавление в систему растворителя. Добавление ионов, нейтрализация заряда системы. Минимизация энергии системы. Уравновешивание системы, приведение к заданным температуре и давлению. Запуск расчета МД траектории. Продолжение расчета МД траектории, увеличение длительности траектории. Анализ МД траектории.

Основы практического применения метода молекулярной динамики на примере программного пакета GROMACS 2020. Советы и хитрости.

Особенности подготовки модели. Добавление нового силового поля в gromacs. Система с несколькими белковыми цепями. Структура файлов топологии. Создание и использование групп. Индексация в gromacs. Создание и использование ограничений, позиционные ограничения, дистанционные ограничения, внутримолекулярные ограничения, межмолекулярные ограничения, простой гармонический потенциал, pull-code. Кристаллическая вода. Продолжение расчета траектории при его нештатном прерывании. Подготовка траектории к анализу и извлечению структурных данных, сборка траектории, посчитанной в несколько этапов, удаление «прыжков», центрирование, удаление периодических условий. Представление данных анализа траектории в EXEL в виде графиков.

Основы компьютерной графики. Основы дизайна и верстки. Создание научных иллюстраций и презентаций.

Создание трехмерной сцены, информативность. СтереоиЗОбражения. Создание стереоиЗОбражения в RuMOL. Подготовка стереопары во внешнем редакторе. Основы визуального восприятия. Некоторые принципы гештальт-теории визуального восприятия (визуальной психологии). Изображение как способ общения. Понятие композиции. Композиционные законы. Пространственно-ориентированные правила и приемы создания композиции. Сетки. Модульная сетка. Корневые прямоугольники и сетки на их основе. Примеры построения сеток на основе соотношения Золотого Сечения. Золотая Спираль. Другие аспекты эмоционального влияния элементов композиции на зрителя, линии. Объектно-ориентированные правила и приемы создания композиции. Цвет. Цветовые пространства. Модели RGB и CMYK. Цветовой охват. Модель Lab. Переходы между цветовыми пространствами. Цветовая иерархия. 12 –ти разрядный цветовой круг. Цветовые контрасты. Семь видов контрастных проявлений. Дальтонизм, его виды и влияние на правила подготовки иллюстраций. Другие варианты объектно-ориентированных методов построения сцены и расстановки акцентов композиции, контраст формы, контраст размеров, контраст детализации, контраст движения. Рекомендуемые программные пакеты для создания научных иллюстраций.

Работа с научной литературой. Наукометрия.

Поиск научной информации в Интернете. Электронные каталоги и библиотеки. Поиск статей по выбранным критериям. Базы данных PUBMED MEDLINE, GOOGLE SCHOLAR, WEB OF SCIENCE, SCOPUS, ELIBRARY. Электронный доступ к публикациям в Интернете.

Основные наукометрические понятия и термины: индекс цитирования статьи, импакт-фактор журнала, индекс Хирша, Использование наукометрических инструментов для оценки статей, журналов, ученых, лабораторий, институтов.

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Контроль успеваемости и качества подготовки обучающихся подразделяется на текущий контроль и промежуточную аттестацию.

Текущий контроль предназначен для проверки хода и качества усвоения учебного материала, стимулирования учебной работы обучающихся и совершенствования методики проведения занятий. Он проводится в ходе всех видов учебных занятий в форме, избранной преподавателем и/или предусмотренной рабочей программой дисциплины

Показатели и критерии оценивания компетенций на этапе изучения дисциплины, описание шкал оценивания

Этапы формирования компетенций:	Контролируемые разделы	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства	Уровни сформированности компетенции в баллах		
1 этап	Модуль I. Основы технологии работы на персональном компьютере и использования баз данных. Современные возможности использования компьютеров в научной работе. Работа с научной литературой. Наукометрия.	ОПК-1; ОПК-2; ПК-3; ПК-4; УК-1; УК-4	Задания для самостоятельных работ	не аттестован низкий средний высокий	2 и менее 3 4 5	
		ОПК-1; ОПК-2; ПК-3; ПК-4; УК-1; УК-4	Задания для практических работ	не аттестован низкий средний высокий	2 и менее 3 4 5	
		макс:				5
		2 этап	Модуль II. Основы статистической обработки данных. Статистическая обработка данных с помощью программ.	ОПК-1; ОПК-2; ПК-3; ПК-4; УК-1; УК-4	Задания для самостоятельных работ	не аттестован низкий средний высокий
ОПК-1; ОПК-2; ПК-3; ПК-4; УК-1; УК-4	Задания для практических работ			не аттестован низкий средний высокий	2 и менее 3 4 5	
макс:				5		

3 этап	Модуль III. Биоинформатика: определение, возникновение, инструменты. Работа с нуклеотидными последовательностями. Работа с аминокислотными последовательностями. Анализ первичных структур белков. Функциональный анализ белковых последовательностей. Вторичная и третичная структура РНК. Алгоритмы и программы предсказания вторичной, третичной и четвертичной структуры белков. Моделирование взаимодействия макромолекул. Методы исследования пространственных структур макромолекул.	ОПК-1; ОПК-2; ПК-3; ПК-4; УК-1; УК-4	Задания для самостоятель ных работ	не аттестован низкий средний высокий	2 и менее 3 4 5
		ОПК-1; ОПК-2; ПК-3; ПК-4; УК-1; УК-4	Задания для практических работ	не аттестован низкий средний высокий	2 и менее 3 4 5
макс:					5
ИТОГО ЗА ТРИ МОДУЛЯ					15

Формы, уровни и критерии оценивания

Форма оценивания	Уровни оценивания	Критерии оценивания
Практические работы	Не аттестован (Не удовлетворительно)	Аспирант имеет отдельные представления об изученном материале; не может полно и правильно ответить на поставленные вопросы, при ответах допускает грубые ошибки; практические работы не выполнены или выполнены с ошибками, влияющими на качество выполненной работы. Практически не посещает занятия.
	Низкий (Удовлетворительно)	Аспирант знает лишь основной материал; на заданные вопросы отвечает недостаточно четко и полно, что требует дополнительных и уточняющих вопросов преподавателя; практические, лабораторные и курсовые работы выполняет с ошибками, не отражающимися на качестве выполненной работы. Посещает занятия, но не системно.
	Средний (Хорошо)	Аспирант твердо знает учебный материал; отвечает без наводящих вопросов и не допускает при ответе серьезных ошибок; умеет применять полученные знания на практике; практические работы выполняет правильно, без ошибок. Посещает занятия, но не в полном объеме.
	Высокий (Отлично)	Аспирант глубоко изучил учебный материал; последовательно и исчерпывающе отвечает на

		поставленные вопросы; свободно применяет полученные знания на практике; практические работы (задания) выполняет правильно, без ошибок, в установленное нормативом время. Посещает занятия практически полностью.
Самостоятельная работа	Не аттестован (Не удовлетворительно)	Аспирант неполно изложил задание; при изложении были допущены существенные ошибки; результаты выполнения работы не удовлетворяют требованиям, установленным преподавателем к данному виду работы.
	Низкий (Удовлетворительно)	Аспирант неполно, но правильно изложил задание; при изложении была допущена 1 существенная ошибка; знает и понимает основные положения данной темы, но допускает неточности в формулировке понятий; излагает выполнение задания недостаточно логично и последовательно; затрудняется при ответах на вопросы преподавателя; материал оформлен неаккуратно или не в соответствии с требованиями.
	Средний (Хорошо)	Аспирант неполно, но правильно изложил задание; при изложении были допущены 1-2 несущественные ошибки, которые он исправляет после замечания преподавателя; дает правильные формулировки, точные определения, понятия терминов; может обосновать свой ответ, привести необходимые примеры; правильно отвечает на дополнительные вопросы преподавателя, имеющие целью выяснить степень понимания аспирантом данного материала; материал оформлен недостаточно аккуратно и в соответствии с требованиями.
	Высокий (Отлично)	Аспирант обстоятельно, с достаточной полнотой излагает соответствующую тему; дает правильные формулировки, точные определения, понятия терминов; может обосновать свой ответ, привести необходимые примеры; правильно отвечает на дополнительные вопросы преподавателя, имеющие целью выяснить степень понимания аспирантом данного материала. Материал оформлен аккуратно в соответствии с требованиями.
Тестирование	Не аттестован (Не удовлетворительно)	Аспирант выполнил работу не полностью или объем выполненной части работы не позволяет сделать правильные выводы.
	Низкий (Удовлетворительно)	Аспирант выполнил работу не полностью, но объем выполненной части таков, что позволяет получить правильные результаты и выводы; в ходе проведения работы были допущены ошибки.
	Средний (Хорошо)	Аспирант выполнил работу в полном объеме с соблюдением необходимой последовательности действий, но допустил 2-3 ошибки.
	Высокий (Отлично)	Аспирант выполнил работу в полном объеме с соблюдением необходимой последовательности действий; в ответе правильно и аккуратно выполняет все записи, таблицы, рисунки, чертежи, графики, вычисления;/или правильно и аккуратно выполнил все задания; правильно выполняет анализ ошибок.

Показатели и критерии оценивания компетенций на этапе сдачи зачета с оценкой по дисциплине, описание шкалы оценивания

По результатам текущего контроля успеваемости за 3 модуля аспирант до экзамена может набрать от 0 до 15 баллов.

Выполнение учебных заданий по дисциплине оценивается от 0 до 15 баллов (до 45 в каждом из 3-х текущего контроля успеваемости).

Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства	Критерии оценивания (Уровни сформированности компетенции)	
ОПК-1; ОПК-2; ПК-3; ПК-4; УК-1; УК-4	Выполнение промежуточных заданий	– не аттестован	0 – 19
		– низкий	20 – 29
		– средний	30 – 39
		– высокий	40 – 45
макс: 45 баллов			

Критерии итогового оценивания сформированности компетенций

Формы оценивания	Уровни оценивания	Критерии оценивания
Ответы (устные или письменные) на вопросы билетов	– не аттестован	50% и менее
	– низкий	51% – 65 %
	– средний	66 % – 84%
	– высокий	85% – 100%

До итогового зачета с оценкой допускается аспирант, набравший сумму в пределах от 20 до 45 баллов (включая оценку по успеваемости и посещаемости). Аспирант, набравший 20 баллов и менее до зачета допускается, но должен добрать недостающие баллы, либо до или во время зачета.

Положительную оценку на зачете успешно выполнившие все тестовые задачи и правильно ответившие на контрольные вопросы.

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций

№ п/п	Наименование оценочного средства	Краткая характеристика оценочного средства	Представление оценочного средства в фонде
1.	Задания для практических работ	Занятие, проводимое под руководством преподавателя в учебной аудитории, направленное на углубление научно-теоретических знаний и овладение определенными методами самостоятельной работы.	Задания для практических занятий
2.	Задания для самостоятельных работ	Самостоятельная работа – это вид учебной деятельности, выполняемый аспирантами без непосредственного контакта с преподавателем или управляемый преподавателем опосредованно через специальные учебные материалы.	Вопросы, задания, темы рефератов для самостоятельных работ
3.	Вопросы к зачету / экзамену	Перечень вопросов для зачета / экзамена	Перечень вопросов к зачету / экзамену

Материально-техническая база для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для групповых лекционных и семинарских занятий, самостоятельной работы студентов, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации используется аудитория № 305 (биотехнологический корпус ИБ РАН). Она оборудована стационарным компьютером с выходом в Интернет и принтером, проектором и стационарным экраном, доской для маркеров, имеет 15 посадочных мест (с возможностью организации дополнительных), 5 столов, и отдельный стол со стулом для преподавателя. В аудитории имеется беспроводной доступ к локальной сети и к сети Интернет.

Для лабораторных и практических занятий, а также для самостоятельной работы студентов, предназначен компьютерный класс (аудитория №521, лабораторный корпус ИБ РАН). Он оборудован пятью стационарными компьютерами с лицензионным программным обеспечением, проектором, подключенному к ноутбуку, и переносным экраном, доской для маркеров, имеет 12 посадочных мест с соответствующим числом компьютерных столов. В аудитории организован беспроводной доступ к локальной сети и к сети Интернет.

Имеющееся лицензионное программное обеспечение: установлен пакет офисных приложений MS Office 2007 (лицензия Open License 43443603 от 30.01.2008) и специализированное свободно-распространяемое программное обеспечение (лицензия GPL) IncScape, Artweaver, QtiPlot, GeneRunner, UGENE, Coot.

Для проведения занятий используются следующие общедоступные специализированные Интернет-ресурсы (БД): PubMed (Medline), UNIPROT, Genbank, PDB-Biological Macromolecular Resource, Inter Pro, European Bioinformatics Institute.

ЛИТЕРАТУРА

ОСНОВНАЯ

1. Структура и функционирование белков. Применение методов биоинформатики. Под ред. Д. Д. Ригдена. Ленанд, Едиториал УРСС. 2014. 424 с. ISBN 978-5-9710-0842-2, 978-5-453-00057-9.
2. Леск А. М. Введение в биоинформатику. Бином. 2009. 324 с. ISBN 978-5-94774-501-6, 0-19-925196-7.
3. Огурцов А.Н. Основы биоинформатики. Харьков: НТУ "ХПИ", 2013. – 400 с.

ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ

1. Genbank: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Genbank/GenbankOverview.html>
2. PDB-Biological Macromolecular Resource: <http://www.pdb.org>
3. European Bioinformatics Institute: <https://www.ebi.ac.uk/>
4. Inter Pro tutorial: <http://www.ebi.ac.uk/interpro/tutorial.html>
5. Введение в кристаллографию макромолекул Crystallography 101: <http://www.ruppweb.org/Xray/101index.html>

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ДЛЯ УГЛУБЛЕННОГО ИЗУЧЕНИЯ ПРЕДМЕТА

1. Даан Френкель, Беренд Смит. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем. Научный мир. 2013 584 с. ISBN 978-5-91522-223-5.

2. Jean-Michel Claverie, Cedric Notredame. Bioinformatics For Dummies, 2nd Edition 2006.
ISBN: 978-0-470-08985-9,