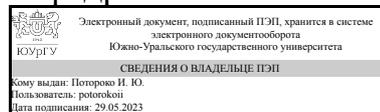


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей
кафедрой



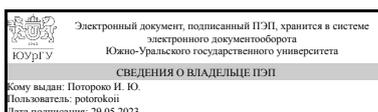
И. Ю. Потороко

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

**дисциплины 1.Ф.М0.11.01 Молекулярное моделирование в биотехнологиях
для направления 19.04.01 Биотехнология
уровень Магистратура
магистерская программа Искусственный интеллект в промышленных и
экологических биотехнологиях
форма обучения очная
кафедра-разработчик Пищевые и биотехнологии**

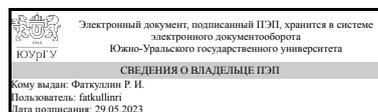
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 19.04.01 Биотехнология, утверждённым приказом Минобрнауки от 10.08.2021 № 737

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. Задачи изучения учебной дисциплины:

- формирование представлений об основных алгоритмах, 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-4 Моделировать развитие биотехнологических процессов в природе | Знает: Объекты и методы молекулярного моделирования в промышленных и экологических биотехнологиях. Современные подходы и программные продукты для оптимизации и моделирования производственных процессов Умеет: Использовать программные продукты для моделирования развития биотехнологических процессов в природе Имеет практический опыт: В сфере моделирования и оптимизации биотехнологических процессов с помощью современных программ средств |
| ПК-5 Способен исследовать применение интеллектуальных систем для различных предметных областей | Знает: Применение комплексов методов и инструментальных средств систем искусственного интеллекта для моделирования в биотехнологиях. Методологию и программные продукты молекулярного моделирования веществ и процессов в промышленных и экологических биотехнологиях Умеет: Пользоваться методами молекулярного моделирования. Решать прикладные задачи и реализовывать проекты в области молекулярного моделирования в промышленных и экологических биотехнологиях Имеет практический опыт: Исследования веществ и процессов в биотехнологиях с использованием молекулярного моделирования на основе специализированных программ и биоинформационного анализа |

| | |
|--|---|
| <p>ПК-7 Способен выбирать и участвовать в проведении экспериментальной проверки работоспособности программных платформ систем, основанных на знаниях, по обеспечению требуемых критериев эффективности и качества функционирования</p> | <p>Знает: Методы постановки задач, проведения и анализа тестовых и экспериментальных испытаний работоспособности систем искусственного интеллекта Умеет: Ставить задачи и участвовать в проведении тестовых и экспериментальных испытаний работоспособности систем искусственного интеллекта, анализировать результаты и вносить изменения Имеет практический опыт: В постановке задачи и участии в проведении тестовых и экспериментальных испытаний работоспособности систем, основанных на знаниях, анализе результатов и внесении изменений</p> |
|--|---|

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

| Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана | Перечень последующих дисциплин, видов работ |
|---|---|
| <p>Искусственные нейронные сети, Основы программирования на языке Python, Искусственный интеллект и машинное обучение</p> | <p>Анализ процессов биотрансформации методами искусственного интеллекта, Диагностические сенсоры для контроля экобезопасности, Управляемая биоремедиация акваресурсов, Производственная практика (преддипломная) (4 семестр)</p> |

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

| Дисциплина | Требования |
|--|---|
| <p>Искусственный интеллект и машинное обучение</p> | <p>Знает: Методы и инструментальные средства систем искусственного интеллекта, критерии их выбора и методы комплексирования в рамках применения интегрированных гибридных интеллектуальных систем различного назначения, Классы методов и алгоритмов машинного обучения Умеет: Выбирать и комплексно применять методы и инструментальные средства систем искусственного интеллекта, критерии их выбора, Ставить задачи и адаптировать методы и алгоритмы машинного обучения Имеет практический опыт: Формирования обучающих наборов данных в области решения профессиональных задач для систем искусственного интеллекта, Постановки задачи и адаптации методов и алгоритмов машинного обучения</p> |
| <p>Основы программирования на языке Python</p> | <p>Знает: Методологию и принципы руководства проектами по созданию, поддержке и использованию комплексных систем на основе</p> |

| | |
|------------------------------|--|
| | <p>аналитики больших данных со стороны заказчика; специфику сфер и отраслей, для которых реализуется проект по аналитике больших данных, Основные библиотеки языка Python для анализа и обработки данных, Методологические подходы к выбору и применению методов обработки и распространения знаний с помощью дедукции, индукции и абдукции, согласования экспертных оценок и нечеткого вывода Умеет: Решать задачи по руководству коллективной проектной деятельностью для создания, поддержки и использования комплексных систем на основе аналитики больших данных со стороны заказчика; выявлять небольшие по масштабу проекты аналитики, которые потенциально могут представлять интерес для ряда подразделений / служб или для организации в целом; выявлять области деловой деятельности, которые потенциально могут получить отдачу от аналитики, Осуществлять предобработку наборов данных для систем искусственного интеллекта, Применять методы обработки и распространения знаний в системах, основанных на знаниях, для решения задач профессиональной деятельности Имеет практический опыт: Решения задач по руководству коллективной проектной деятельностью для создания, поддержке и использованию комплексных систем на основе аналитики больших данных со стороны заказчика, Работы в среде программирования Python, Применения методов обработки и распространения знаний в системах, основанных на знаниях, для решения задач профессиональной деятельности</p> |
| Искусственные нейронные сети | <p>Знает: Принципы построения систем компьютерного зрения, методы и подходы к планированию и реализации проектов по созданию систем искусственного интеллекта на основе сквозной цифровой субтехнологии «Компьютерное зрение», Принципы построения систем компьютерного зрения, методы и подходы к планированию и реализации проектов по созданию систем искусственного интеллекта на основе сквозной цифровой субтехнологии «Компьютерное зрение», Модели искусственных нейронных сетей, основные подходы решения профессиональных задач на базе искусственных нейронных сетей Умеет: Решать задачи по выполнению коллективной проектной деятельности для создания, поддержки и использования систем искусственного интеллекта на основе сквозной цифровой субтехнологии «Компьютерное зрение» со стороны заказчика, Решать задачи по</p> |

| | |
|--|---|
| | <p>выполнению коллективной проектной деятельности для создания, поддержки и использования систем искусственного интеллекта на основе сквозной цифровой субтехнологии «Компьютерное зрение» со стороны заказчика, Осуществлять настройку параметров и обучение искусственных нейронных сетей для решения задач в профессиональной области Имеет практический опыт: Решения задач по выполнению коллективной проектной деятельности для создания, поддержке и использованию систем искусственного интеллекта на основе сквозной цифровой технологии «Компьютерное зрение» со стороны заказчика, Решения задач по выполнению коллективной проектной деятельности для создания, поддержке и использованию систем искусственного интеллекта на основе сквозной цифровой технологии «Компьютерное зрение» со стороны заказчика, Решения профессиональных задач с использованием искусственных нейронных сетей</p> |
|--|---|

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 ч., 74,5 ч. контактной работы

| Вид учебной работы | Всего часов | Распределение по семестрам | |
|--|-------------|----------------------------|--|
| | | в часах | |
| | | Номер семестра | |
| | | 3 | |
| Общая трудоемкость дисциплины | 144 | 144 | |
| <i>Аудиторные занятия:</i> | 64 | 64 | |
| Лекции (Л) | 32 | 32 | |
| Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ) | 32 | 32 | |
| Лабораторные работы (ЛР) | 0 | 0 | |
| <i>Самостоятельная работа (СРС)</i> | 69,5 | 69,5 | |
| Работа с конспектами лекций и научной литературой | 29,5 | 29,5 | |
| Подготовка и представление отчетов по практическим работам | 20 | 20 | |
| Подготовка к текущим контрольным мероприятиям и промежуточной аттестации | 20 | 20 | |
| Консультации и промежуточная аттестация | 10,5 | 10,5 | |
| 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 | 4 | 4 | 0 | 0 |
| 2 | Структура молекул и силовые поля. Молекулярная механика | 10 | 6 | 4 | 0 |
| 3 | Молекулярная динамика в расчетах биомолекул. Основные понятия и алгоритмы молекулярной динамики. | 10 | 6 | 4 | 0 |
| 4 | Основы моделирования малых молекул | 8 | 4 | 4 | 0 |
| 5 | Основы моделирования больших молекул | 14 | 6 | 8 | 0 |
| 6 | Молекулярный дизайн комплексов молекул. Поиск новых биоактивных молекул и химоинформатика | 18 | 6 | 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. | 4 |
| 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. | 6 |
| 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. | 4 |
| 5 | 4 | Основы моделирования малых молекул. Силовые поля для малых молекул. Конформационный анализ, минимизация энергии, поиск локальным минимумом | 4 |
| 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. | 6 |
| 6 | 6 | Молекулярный дизайн комплексов молекул. Молекулярные дескрипторы. Количественное описание структура-активность. | 2 |
| 7 | 6 | Методология QSAR моделирования и основные алгоритмы (MoS, Altel) в молекулярном моделировании и предсказании свойств молекулярных комплексов. Программное обеспечение, базы данных. | 4 |

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 ViS и CiS | 4 |
| 8 | 6 | Создание псевдоатомной модели. Анализ взаимосвязи биологической активности 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 |
| Работа с конспектами лекций и научной литературой | Молекулярное моделирование: теория и практика : учебное пособие / Х. -. Хельтье, 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. 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 | 3 | 29,5 |
| 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 Баскин, И. И. Введение в | 3 | 20 |

| | | | |
|---|--|---|----|
| | <p>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.</p> | | |
| <p>Подготовка к текущим контрольным мероприятиям и промежуточной аттестации</p> | <p>Молекулярное моделирование: теория и практика : учебное пособие / Х. - Хельтье, 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. 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. 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.</p> | 3 | 20 |

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 | 3 | 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 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 |
| 2 | 3 | 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 | экзамен |

| | | | | | | | |
|---|---|--------------------------|--|-----|-----|--|---------|
| | | | | | | 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 | |
| 3 | 3 | 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 | 3 | 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 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. | экзамен |

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Не предусмотрены

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

| Компетенции | Результаты обучения | № КМ | | | |
|-------------|---|------|---|----|---|
| | | 1 | 2 | 3 | 4 |
| ПК-4 | Знает: Объекты и методы молекулярного моделирования в промышленных и экологических биотехнологиях. Современные подходы и программные продукты для оптимизации и моделирования производственных процессов | | | ++ | |
| ПК-4 | Умеет: Использовать программные продукты для моделирования развитие биотехнологических процессов в природе | + | | | + |
| ПК-4 | Имеет практический опыт: В сфере моделирования и оптимизации биотехнологических процессов с помощью современных программ средств | + | | | + |
| ПК-5 | Знает: Применение комплексов методов и инструментальных средств систем искусственного интеллекта для моделирования в биотехнологиях. Методологию и программные продукты молекулярного моделирования веществ и процессов в промышленных и экологических биотехнологиях | | | ++ | |
| ПК-5 | Умеет: Пользоваться методами молекулярного моделирования. Решать прикладные задачи и реализовывать проекты в области молекулярного моделирования в промышленных и экологических биотехнологиях | | | | + |
| ПК-5 | Имеет практический опыт: Исследования веществ и процессов в биотехнологиях с использованием молекулярного моделирования на основе специализированных программ и биоинформационного анализа | | | | + |
| ПК-7 | Знает: Методы постановки задач, проведения и анализа тестовых и экспериментальных испытаний работоспособности систем искусственного интеллекта | | | ++ | |
| ПК-7 | Умеет: Ставить задачи и участвовать в проведении тестовых и экспериментальных испытаний работоспособности систем искусственного интеллекта, анализировать результаты и вносить изменения | | | | + |
| ПК-7 | Имеет практический опыт: В постановке задачи и участии в проведении тестовых и экспериментальных испытаний работоспособности систем, основанных на знаниях, анализе результатов и внесении изменений | | | | + |

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
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.

б) дополнительная литература:

1. 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
2. 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. Мастрюкова, Ю. Н. Панченко. - М.: Мир, 1990. - 384 с. ил.
3. 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.
4. 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.
5. Эткинс, П. Молекулы [Текст] П. Эткинс ; пер. с англ. А. А. Кирюшкина. - М.: Мир, 1991. - 215 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. -. Хельтге, В. Зипшль, 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 литература | Электронно-библиотечная система издательства Лань | Юрчук, С. Ю. Компьютерное моделирование нанотехнологий, 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. -Thr Cambridge Crystallographic Data Centre(бессрочно)
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. |