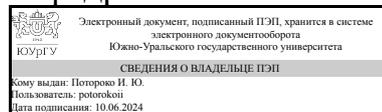


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей
кафедрой



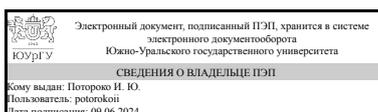
И. Ю. Потороко

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**

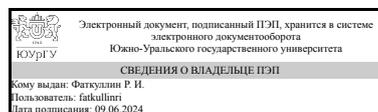
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 19.04.01 Биотехнология, утверждённым приказом Минобрнауки от 10.08.2021 № 737

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>Искусственный интеллект и машинное обучение, Искусственные нейронные сети, Основы программирования на языке Python</p>	<p>Управляемая биоремедиация акваресурсов, Анализ процессов биотрансформации методами искусственного интеллекта, Диагностические сенсоры для контроля экобезопасности, 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>Искусственные нейронные сети</p>	<p>Знает: Принципы построения системкомпьютерного 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, 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» 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, Осуществлять настройку параметров и обучение искусственных</p>

	<p>нейронных сетей для решения задач в профессиональной области, 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</p> <p>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 профессиональных задач с использованием искусственных нейронных сетей, 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</p>
<p>Основы программирования на языке Python</p>	<p>Знает: Методологию и принципы руководства проектами по созданию, поддержке и использованию комплексных систем на основе 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 с помощью дедукции, индукции и абдукции, согласования экспертных оценок и нечеткого вывода</p> <p>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</p> <p>Имеет практический опыт: Решения задач по руководству коллективной проектной деятельностью для создания, поддержке и использованию комплексных систем на основе аналитики больших данных со</p>

	стороны заказчика, Работы в среде программирования Python, Применения методов обработки и распространения знаний в системах, основанных на знаниях, для решения задач профессиональной деятельности
Искусственный интеллект и машинное обучение	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

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 трудоёмкость 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 к текущим контрольным мероприятиям и промежуточной аттестации	20	20
Подготовка и представление отчетов по практическим работам	20	20
Консультации и промежуточная аттестация	10,5	10,5
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен

5. Содержание дисциплины

№	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий
---	----------------------------------	--------------------------

раздела		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 изменения. 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 минимумов	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 к текущим контрольным мероприятиям и промежуточной аттестации	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. —	3	20

	<p>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. Мастрюкова, 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>		
<p>Подготовка и представление отчетов по практическим работам</p>	<p>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 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>3</p>	<p>20</p>

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	экзамен

						<p>правилам компьютерного набора текста) 0-10 баллов</p> <p>7. Качество представленного в отчете иллюстративно-графического материала 0-10 баллов</p> <p>8 Полнота и информативность полученных выводов, их соответствие поставленным задачам 0-10 баллов</p> <p>9. Умение работать в команде 0-10 баллов</p>	
3	3	Текущий контроль	Подготовка презентации по теоретическому курсу	0,2	100	<p>Раскрытие проблемы - 0-20 баллов</p> <p>Представление - 0-20 баллов</p> <p>Оформление 0-20 баллов</p> <p>Ответы на вопросы 0-20 баллов</p>	экзамен
4	3	Промежуточная аттестация	Экзамен	-	100	<p>Знания, умения и навыки обучающихся при промежуточной аттестации в форме экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».</p> <p>«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.</p> <p>«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.</p> <p>«Удовлетворительно» – Допускаются нарушения в последовательности изложения при ответе. Демонстрируются поверхностные знания профильных дисциплин. Имеются затруднения с выводами. Определения и понятия даны не чётко.</p> <p>«Неудовлетворительно» – Материал излагается непоследовательно, сбивчиво, не представляет определенной системы знаний. Не даны ответы на дополнительные вопросы комиссии. Допущены грубые ошибки в определениях и понятиях.</p>	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. 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. — 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. -The Cambridge Crystallographic Data Centre(31.12.2023)
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
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.
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.