



دانشگاه الزهرا
دانشکده علوم ریاضی

نیم سال اول ۱۴۰۲		نام درس: مدلسازی و پیشگویی ساختار ماکرومولکولها		مدرس: محبوبه ضرابی
نوع درس و تعداد واحد: نظری - ۳ واحد		پیش نیاز: زیست شناسی سلولی و مولکولی		رشته و مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد بیوانفورماتیک
تاریخ آزمون پایان ترم: مطابق برنامه امتحانات تاریخ آزمون میان ترم: جلسه چهاردهم		ارزیابی:		
		آزمون میانی		۳۰ درصد
		آزمون پایانی		۴۰ درصد
		پروژه		۲۰ درصد
		تکالیف و کار کلاسی		۱۰ درصد
ایمیل استاد: mzarrabi@alzahra.ac.ir				
هدف کلی: هدف از این درس آشنایی با اصول ساختاری پروتئینها و اسیدهای نوکلئیک بوده و روشهای محاسباتی پیشگویی ساختار دوم و سوم ماکرومولکولها بررسی خواهد شد. همچنین اطلاعاتی در زمینه پیشگویی عملکرد و میانکنش ماکرومولکولها با هم در اختیار دانشجویان قرار خواهد گرفت.				
مراجع: ۱- Protein Modelling, Gábor Náray-Szabó, Springer Cham (۲۰۱۴) ۲- کتاب بیوانفورماتیک: راهنمای درسی و عملی. جاناتان پوسنر، سعیدرضا وصال (مترجم) ناشر: دانشگاه فردوسی مشهد				
جلسه	شرح درس			
اول	معرفی درس، اصول ساختار ماکرو مولکولها، اهمیت و ضروری دسترسی به ساختار ماکرو مولکولها			
دوم	بررسی پایگاههای داده توالی ماکرو مولکولها و معرفی نرم افزارهای همترازی			
سوم	نرم افزار های همترازی دوتایی			
چهارم	معرفی نرم افزارهای همترازی چندتایی و کاربرد آن در شناسایی مناطق حفاظت شده			
پنجم	معرفی پایگاههای دادم موتیف و دمن			
ششم	معرفی انواع اسیدامینه ها به عنوان واحدهای سازنده پروتئین و بررسی ساختار اول و دوم			
هفتم	انواع ساختار دوم پروتئین ، پایگاه داده ساختار دوم			
هشتم	ساختار سوم و چهارم پروتئین و آشنایی با پایگاه داده PDB			
نهم	آشنایی با پایگاه داده PDBsum			
دهم	روشهای فولدینگ پروتئین			
یازدهم	معرفی نوکلئوتیدها به عنوان واحدهای سازنده اسیدهای نوکلئیک و بررسی ساختار اول و دوم			
دوازدهم	ساختار دوم و سوم در DNA , RNA			
سیزدهم	پایگاههای داده ساختاری در اسیدهای نوکلئیک			
چهاردهم	میانترم			
پانزدهم	روشهای پیشگویی ساختار دوم پروتئینها			

روشهای پیشگویی ساختار سوم پروتئینها ، swiss model	شانزدهم
آشنایی با نرم افزار مدلر	هفدهم
بهینه سازی و ارزیابی ساختارهای مدل شده	هجدهم
روشهای پیشگویی عملکرد ماکرو مولکولها	نوزدهم
روشهای پیشگویی میانکنش ماکرو مولکولها	بیستم
نرم افزار VMD , spdb viewer	بیست و یکم
داکینگ (تئوری و انواع روشهای داکینگ)	بیست و دوم
نرم افزارهای داکینگ	بیست و سوم
جمع بندی و رفع اشکال	بیست و چهارم