



## ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН

1000 София  
ул. „Сердика“ № 4  
<http://edu.bas.bg>

email: [tdc-phd@cu.bas.bg](mailto:tdc-phd@cu.bas.bg)  
тел.: 02 987 31 67  
02 979 52 60

---

### Образец за специализиран докторантски курс (на български език)

#### Основна информация:

Име на курса: Структурна биология

Лектор: Доц. д-р Кирил Кирилов

Телефон: 0877886889

Имейл: [.kkirilov@bio21.bas.bg](mailto:.kkirilov@bio21.bas.bg)

Хорариум: 30 учебни часа

#### Анотация (до 150 думи):

Структурната биология е интердисциплинарна научна област, която изследва триизмерната организация на биомолекулите и връзката между тяхната структура, енергетика, динамика и биологична функция. Основната ѝ цел е да разкрие фундаменталните молекулни механизми, които определят функционирането на биологичните системи. Курсът разглежда принципите на организация и сгъване на белтъците, ролята на междуатомните взаимодействия и енергетиката на стабилизацията на протеиновите конформации, както и механичните свойства и динамиката на макромолекулите. Представени са основните експериментални методи за определяне на триизмерна структура – рентгенова кристалография, крио-електронна микроскопия и ядрено-магнитен резонанс – както и съвременни изчислителни подходи в структурната биоинформатика. Разглеждат се прогнозиране на протеинова структура, молекулен докинг и молекулна динамика за анализ на конформационната динамика, стабилността и взаимодействията на биомолекулни комплекси. Практическите упражнения включват използване на софтуерни пакети за молекулно моделиране, симулации и структурен анализ.

#### Тематично съдържание на курса

Тема / Модул 1 – Структурна организация на биомолекулите

Основи на структурната биология. Нива на организация на протеиновата структура. Структура на нуклеиновите киселини. Връзка между структура и биологична функция.

Тема / Модул 2 – Енергетика, динамика и молекулни взаимодействия

Молекулни взаимодействия и енергийни фактори, определящи стабилността на биомолекулните структури. Организация на протеин–лиганд и протеин–протеинови комплекси. Основи на молекулната динамика – силови полета, компютърни симулации и анализ на траектории.

Тема / Модул 3 – Методи и изчислителни подходи в структурната биология

Сравнителен преглед на експерименталните методи (рентгенова кристалография, крио-ЕМ, ЯМР) и структурната информация, която предоставят. Структурна биоинформатика и молекулно моделиране – структурно подравняване, прогнозиране на структура, анализ на взаимодействия. Изчисляване на свободни енергии на свързване чрез методи MM/PBSA и MM/GBSA.

#### Форми на обучение и оценяване:

Лекции.

Практически упражнения със специализиран софтуер.

Анализ на структурни биологични данни.

Оценяване чрез устно събеседване.



## **ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН**

1000 София  
ул. „Сердика“ № 4  
<http://edu.bas.bg>

*email:* [tdc-phd@cu.bas.bg](mailto:tdc-phd@cu.bas.bg)  
*тел.:* 02 987 31 67  
02 979 52 60

---

### **Компетентности, придобити в резултат на обучението (3-5 точки):**

След завършване на курса докторантите ще могат:

1. да интерпретират триизмерни структури на биомолекули;
2. да използват методи за структурен анализ и моделиране;
3. да анализират молекулни взаимодействия;
4. да провеждат и анализират молекулно-динамични симулации;
5. да използват специализиран софтуер за структурна биология.

### **Литература:**

Branden C., Tooze J. – Introduction to Protein Structure

Petsko G., Ringe D. – Protein Structure and Function

Leach A. – Molecular Modelling: Principles and Applications

**Допълнителна информация (по желание)** (например: специални изисквания, лабораторно оборудване, предварителни знания):

Препоръчителни предварителни знания:

биохимия, молекулярна биология, биофизика или биоинформатика.

Използван софтуер: