**计算生物化学 课程教学大纲**

|  |
| --- |
| 课程基本信息（Course Information） |
| 课程代码（Course Code） | BI472 | 学时（Credit Hours） | 48 | 学分（Credits） | 3.0 |
| 课程名称（Course Name） | 计算生物化学 |
| Computational Biochemistry |
| 课程性质(Course Type) | 培养计划内课程 |
| 授课对象（Target Audience） | 生物信息学专业本科生 |
| 授课语言(Language of Instruction) | 中外双语 |
| 开课院系（School） | 生命科学技术学院 |
| 先修课程（Prerequisite） | 《生物化学》 |
| 授课教师（Teacher） | 赵一雷、石婷 | 课程网址(Course Webpage) |  |
| \*课程简介（Description） | （中文版，含概括描述课程目标）作为计算生物学的专业课，《计算生物化学》强调生物化学分子机理研究的基础理论和计算方法。课程主要分为三个部分：“生物化学模型”介绍复杂生物系统的建模问题；“结构生物信息学”从生物信息学角度介绍核酸和蛋白质结构数据库，以及药物小分子和代谢小分子的化学信息学；“分子模拟”部分则重点介绍现代量子化学计算和分子力场计算在生物化学中的应用。作为生物信息学专业的必修课程，《计算生物化学》需要照顾到理工科生物科学、生物工程学生对现代计算机技术基础知识和化学生物学学科发展的需要。和传统的教学模式相比较，这门课程是原来的《分子模拟》和”结构生物信息学”两门课程的重新组合。内容中强化了化学生物学等生物学新兴领域的应用例子，减少了量子力学、计算方法等专业性比较强的内容。其最直接的先行课程是《生物化学》，定性地讲授生物分子的结构和功能。而在高性能科学结构计算模拟方向希望深入学习的学生可以选修后续课程如”量子化学”、”大规模科学计算”、”大数据”等专业课程。和本课程配套的实验课程是《分子模拟》实验，作为后续选修课程的实验课行课时间滞后一学期。 |
| \*课程简介（Description） | （所有课程必须填写英文版；内容含概括描述的课程目标） "Computational Biochemistry," as one of computational biology courses, emphasizes the basic theory and computational methods for molecular mechanisms of biochemical processes. Course is divided into three parts: "Biochemical models" describes modeling of complex biological systems; "Structural bioinformatics" describes nucleic acid and protein databases, as well as cheminformatics of small molecule drugs and metabolites; "Molecular modeling" part focuses on modern quantum chemical calculations and force field applications in biochemistry. As a required courses for bioinformatics students, "Computational Biochemistry" take care of the needs of biological science and engineering, modern computer technology, and the emerging chemical biology discipline. Compared to the traditional teaching model, this course reassembled the original "Molecular Modeling" and "Structural Bioinformatics" two courses. Contentsof the course strengthened the case studies of chemical biology, reducing quantum mechanics and computational algorithms. Its antecedent course is "biochemistry", qualitatively covering structure-function relationship of biomolecules. For further study in high-performance scientific computing simulation direction, students can follow elective courses such as "Quantum Chemistry", "Large-scale scientific computing", "Big data" and other professional courses. The experimental curriculum of this course is "Molecular modeling experiment” as onesubsequent elective course. |
| 课程教学大纲（course syllabus）第1章生物化学系统的图形描述 (Graphical Representation of Biochemical Systems)* 生化概念图(Concept Mapsof Biochemistry)
* 变量和参数(Variables and Parameters)
* 建图三原则(Rules for Constructing a Proper Map)
	+ 全组份(All Components)
	+ 作用和调控 (All Interactions and Modulations)
	+ 布局(Arrangement)

第2章生物化学系统的模型 (Models of Biochemical Systems)* 演变 (Change)
* 反应常数和阶 (Reaction Rate and Order)
* S－生物化学系统模型 (S-System Models)
* 幂函数模型(Power-function Representation)
* 定量网络模型(Stoichiometric Network Model)

第3章从示意图到方程式(From Map to Equation)* 独立和非独立变量(Dependent and Independent Variable)
* 线性途径(Linear Pathway)
* 瀑布模型(Cascades)
* 闭合系统和开放系统(Closed and Open systems)

第4章生物分子的结构基础和分子机理 (Structural Base and Molecular Mechanisms)* 氨基酸、核苷酸及代谢小分子化学结构(Chemical Structures of Amino Acids, Nucleic Acids, and Metabolites)
* 生物有机反应(Bioorganic Reactions)
* 锁钥学说和诱导契合(Lock-and-Keyand Induced-Fit Theories)
* 过渡态和活化能(Transition States and Activation Energy)
* 邻近效应、定向效应、酸碱效应(Effects of Proximity, Orientation, and Acid-base)

第5章蛋白质核酸数据描述和数据库(Structural Databases of Proteins and Nucleoids)* PDB、mmCIF及其他数据格式(Data Format of Structural Databases)
* SCOP、CATH等数据库(Featured Databases)
* 蛋白质二级、三级、四级结构 (Secondary and Higher Structures of Protein)
* 核酸结构表示(Exploration of Nucleic Acid)

第6章分子模拟的数理基础 (Physical Chemical Principle of Molecular Modeling)* 量子力学起源 (Origin of Quantum Mechanistic)
* 微观系统的动力学(Microscopic Dynamics)
* 平动、转动、振动的量子描述 (Quantum Description of Translation, Rotation, and Vibration)
* 原子轨道和分子轨道(Atomic and Molecular Orbitals)
* 分子力场(Force Fields)
* 分子动力学模拟(Molecular Dynamic Simulation)

第7章代谢途径和反应途径(Pathway of Metabolism and Reaction)* 厌氧发酵代谢途径分析(Anaerobic Fermentation Pathway)
* 酶抑制动力学(Enzymatic Kinetics)
	+ 竞争性抑制(Competitive Inhibition)
	+ 非竞争性抑制(Noncompetitive Inhibition)
	+ 反竞争性抑制(Uncompetitive Inhibition)
	+ 混合抑制(Mixed type)
* QM-MM计算(QM/MMCalculation)
	+ 变构效应MD计算(Allosteric Effects)
	+ 活化能计算（Activation Energy)
 |
| \*学习目标(Learning Outcomes) | 1．学会用网络图解进行生物化学过程建模(A5.3)2．学会从生化动力学数据中提取代谢通路的动力学参数(A5.3)3．学会利用结构数据在分子结构基础上解释生化系统动力学(A5.4)4. 尝试利用计算模拟的方法进行分子、基因、通路和系统设计(A5.4)5.学会使用计算化学生物学常用软件（Chemoffic, Gaussian, GaussView, Amber等）(A5.4) |
| \*教学内容、进度安排及要求(Class Schedule&Requirements) |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 教学内容 | 学时 | 教学方式 | 作业及要求 | 基本要求 | 考查方式 |
| 第1章 | 4 | 授课 | 有 | 文献阅读 | 报告 |
| 第2章 | 4 | 授课 | 有 | Chemoffice | 建模 |
| 第3章 | 4 | 授课 | 有 | matlab | 建模 |
| 第4章 | 4 | 授课 | 有 | Gaussian | 结构计算 |
| 第5章 | 4 | 授课 | 有 | 文献阅读 | 报告 |
| 第6章 | 4 | 授课 | 有 | Amber | 分子模拟 |
| 第7章 | 4 | 授课 | 有 | Gaussian | 反应能垒 |
| 实验1 | 4 | 授课 | 有 | Gaussian | 结构计算 |
| 实验2 | 4 | 授课 | 有 | Amber | 建模1 |
| 实验3 | 4 | 授课 | 有 | Amber | 建模2 |
| 实验4 | 4 | 授课 | 有 | Amber | 轨迹分析 |
| 实验5 | 4 | 授课 | 有 | Amber | 结果分析 |
|  |  |  |  |  |  |

 |
| \*考核方式(Grading) | 出勤率 10%平时作业 10%课堂测验 10% 读书笔记 10%大作业 20%期末考试 40% |
| \*教材或参考资料(Textbooks & Other Materials) | 1. Computational Analysis of Biochemical Systems (生物化学系统的计算分析), E.O. Voit2. The Molecules of life – Physical and Chemical Principles (生命分子的物化基础), J. Kuriyan等 |
| 其它（More） |  |
| 备注（Notes） |  |

备注说明：

1．带\*内容为必填项。

2．课程简介字数为300-500字；课程大纲以表述清楚教学安排为宜，字数不限。