



آکادمی زیستا
ISTA ACADEMY
شماره 2

زیستا ساختار

از دینامیک تا طراحی محاسباتی

- نوبل از دریچه بیولوژی ساختار
- مولکول ماه - CLOCK protein
- ایده های محاسباتی روی CLOCK
- گیاهان بومی ایران و سرطان
- جهان پروتئینی با زیستا

آدرس سایت آکادمی زیستا

<https://www.zistaacademy.com/>

آدرس اینستاگرام آکادمی زیستا

https://www.instagram.com/zista_academy/

آدرس تلگرام آکادمی زیستا

https://t.me/Zista_academy_support

زیستاساختار شماره ۲

منتشر شده تحت افیلیشن آکادمی زیست،

نهاد پژوهشی شناخته شده در پایگاه Elsevier (Elsevier-indexed affiliation, 2025)

از دینامیک تا طراحی محاسباتی

صاحب امتیاز و سردبیر: دکتر نجمه دهقان بنادکی

طراح پوستر: علی دهقان بنادکی

Structural Biology Monthly – Issue 2

فهرست مطالب:

نوبل از دریچه بیولوژی ساختار

- آینده بیولوژی ساختار: از مشاهده تا شبیه سازی – مروری بر گذار علم ساختار از مشاهده تجربی به دوران شبیه سازی اتمی و مدل سازی هوش مصنوعی.
- مولکول ماه: پروتئین CLOCK – معرفی پروتئین کلیدی چرخه شبانه روزی و نقش آن در تنظیم متابولیسم و ریتم زیستی بدن.
- دیدگاه محاسباتی – شبیه سازی ساعت مولکولی – تحلیل دینامیکی تعاملات CLOCK-BMAL1 با روش های Docking و Molecular Dynamics برای درک ریتم شبانه روزی در سطح اتمی.
- گیاهان بومی ایران و سرطان – مهار آنزیم LDH و مسیر متابولیک سرطان توسط ترکیبات طبیعی بومی از انار و سماق با رویکرد محاسباتی.
- دوره ۴۵ ساعته آکادمی زیست – جهان پروتئین – معرفی برنامه جامع طراحی پپتید و مطالعات ساختاری با پوشش ۷۰٪ از پایگاه RCSB برای پژوهشگران عملی.



نوبل از دریچه بیولوژی ساختار

تاریخ علم را می‌توان از مسیر جوایز نوبل بازخوانی کرد؛ زیرا این جوایز اغلب نه فقط پاداش یک کشف، بلکه نمود لحظاتی‌اند که نگاه ما به حیات تغییر کرده است. در بیولوژی ساختاری، هر نوبل داستانی از کشف شکل و معماری مولکول‌های زنده است - از نخستین مدل‌های پروتئینی تا بینش‌های ژنی که امروز در درمان بیماری‌ها به کار می‌آیند.

۱. آغاز با ژنتیک و پیوند ساختار-عملکرد (۱۹۵۸)

سال ۱۹۵۸، **George Beadle**، **Edward Tatum** و **Joshua Lederberg** نشان دادند که هر ژن محصولی دارد که ساختار و عملکرد آن، کلید فهم پدیده‌های زیستی است. بنیانی که مسیر بعدی نوبل‌ها را شکل داد.

۲. مارپیچ دوگانه و رمز زندگی (۱۹۶۲)

۱۹۶۲ نقطه عطف بود: ساختار مارپیچ دوگانه DNA به دست **Watson** و **Crick** و **Wilkins** رمز ذخیره اطلاعات ژنتیکی را آشکار کرد، و همزمان **Perutz** و **Kendrew** ساختار دقیق هموگلوبین و میوگلوبین را تعیین کردند - نخستین تصاویر جزئی از ماشین‌های زیستی.

۳. فراتر از غشاء (۱۹۸۸)

کشف ساختار کمپلکس فتوسنتزی باکتریایی توسط **Huber**، **Michel** و **Deisenhofer** در ۱۹۸۸، آغاز عصر تازه‌ای بود که در آن، پروتئین‌های غشایی و مسیر انتقال انرژی مطالعه‌پذیر شدند.

۴. ماشین انرژی (۱۹۹۷)

با نوبل **Boyer**، **Walker**، **Skou** در ۱۹۹۷، چرخ مولکولی ATP synthase به نمایش درآمد - موتور میکروسکوپی که انرژی حیات را تولید می‌کند.

۵. دیدن جریان یون‌ها (۲۰۰۳)

Roderick MacKinnon در ۲۰۰۳ ساختار کانال‌های یونی را آشکار کرد و نشان داد انتخاب یون‌ها توسط سلول چگونه با دقت اتمی صورت می‌گیرد.

۶. ماشین رونویسی (۲۰۰۶)

Roger Kornberg ساختار RNA polymerase II را ثبت کرد؛ ماشین پیچیده‌ای که دستورالعمل ژنتیکی را به پیام‌های قابل خواندن برای سلول تبدیل می‌کند.

۷. ترجمهٔ زبان ژن‌ها (۲۰۰۹)

ریبوزوم—ماشین ترجمهٔ ژنتیک—به دست **Yonath, Steitz, Ramakrishnan** در ۲۰۰۹ آشکار شد و دوران تحلیل ساختاری پروتئین‌های عظیم آغاز گردید.

۸. سیگنال‌های مولکولی (۲۰۱۲)

در ۲۰۱۲، **Lefkowitz** و **Kobilka** گیرنده‌های GPCR را به تصویر کشیدند: راه سلول برای شنیدن پیام‌های شیمیایی محیط.

۹. انقلابی به نام Cryo-EM (۲۰۱۷)

در ۲۰۱۷، **Henderson, Frank, Dubochet** نشان دادند که می‌توان با میکروسکوپی کرایوآلکترونی ساختار مولکول‌ها را در حالت طبیعی دید، بی‌نیاز از بلور.

۱۰. نانو در خدمت زیست‌دید (۲۰۲۳)

Ekimov, Brus, Bawendi با نقاط کوانتومی (Quantum Dots) راهی برای ردیابی مسیرهای زیستی یافتند—اتصال فیزیک نانو با زیست‌شناسی مولکولی.

۱۱. کد ایمنی و ژن FOXP3 (۲۰۲۵)

امسال، **Mary Brunkow**، **Fred Ramsdell** و **Shimon Sakaguchi** نوبل پزشکی را برای کشف ژن **FOXP3** دریافت کردند؛ ژنی از خانواده **FOX (Forkhead Box)** که پروتئینی کلیدی با ناحیه‌ی اتصال DNA از نوع *winged helix* کد می‌کند. این پروتئین در مرکز کنترل سلول‌های T تنظیمی (Treg) قرار دارد و تعادل ایمنی را حفظ می‌کند. فهم ساختار این پروتئین و دینامیک اتصالش به DNA، دروازه‌ی درمان‌های نسل جدید ایمنی‌درمانی است.

آینده‌ی بیولوژی ساختار: از مشاهده تا شبیه‌سازی

درحالی‌که ابزارهای نو تصویربرداری مرزهای مشاهده را جابه‌جا کرده‌اند، اکنون بیولوژی ساختار با



دقتی محاسباتی نیز بازخوانی می‌شود. یکی از مسیرهای پیشرو، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) پروتئین **FOXP3** است — مدلی که می‌تواند رفتار ساختاری این مولکول را هنگام اتصال به DNA و کوفاکتورهای بیان ژن پیش‌بینی کند.

در این چارچوب، با استفاده از داده‌های ساختاری پایگاه PDB و اجرای شبیه‌سازی در مقیاس صدها نانوثانیه، می‌توان پایداری

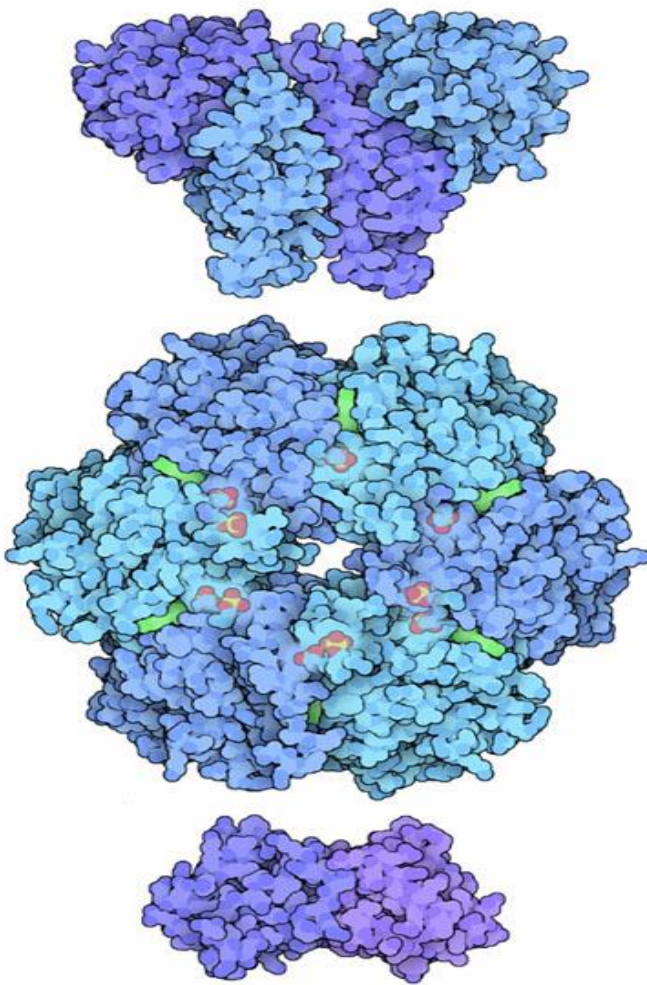
ناحیه‌ی *winged helix* و انرژی‌های اتصال را با روش‌های **MM-PBSA** محاسبه کرد. چنین تحلیل‌هایی عملاً ادامه‌ی منطقی مسیر نوبل ۲۰۲۵ است: انتقال بیولوژی ساختار از تصویر ایستا به ماده‌ای دینامیک و قابل پیش‌بینی.

این نگاه جدید، پلی است میان گذشته‌ی تجربی و آینده‌ی دیجیتال، جایی که مدل‌های محاسباتی نه فقط توضیح‌دهنده، بلکه پیش‌بین و طراحی‌کننده‌ی رفتار مولکول‌های زیستی خواهند بود.

مولکول ماه: پروتئین CLOCK

نام کامل: Circadian Locomotor Output Cycles Kaput

نقش: تنظیم‌کننده‌ی اصلی چرخه‌های شبانه‌روزی سلول



در هر سلول بدن پستانداران ساعتی مولکولی وجود دارد که زمان را حس می‌کند، خواب و بیداری، دما، و متابولیسم را هماهنگ نگه می‌دارد. قلب این ساعت، پروتئینی است به نام **CLOCK**—مولکولی که مانند رهبر ارکستر روز و شب، ریتم ژنی بافت‌ها را کنترل می‌کند.

CLOCK در هسته سلول عمل می‌کند و همراه با **BMAL1** دایمر می‌سازد. این کمپلکس به نواحی *E-box* در DNA متصل می‌شود و بیان ژن‌هایی نظیر **PER** و **CRY** را فعال می‌کند. محصولات این ژن‌ها سپس به **CLOCK-BMAL1** باز می‌گردند و آن را مهار می‌کنند، تا چرخه‌ای ۲۴ ساعته از فعال‌سازی و خاموشی شکل گیرد—یک نوسان ساختاری-زمانی که ساعت زیستی کل ارگانیسم را تنظیم می‌کند.

از دید ساختاری، **CLOCK** یک فاکتور رونویسی از خانواده **bHLH-PAS** است. دو دومین **PAS** امکان اتصال به **BMAL1** و تشکیل یک دایمر پایدار را فراهم می‌کنند، در حالی که حفره‌های هیدروفوب **PAS-B** در **CLOCK** مسیرهای انتقال سیگنال را تنظیم می‌کند. تعیین ساختار این کمپلکس با **Cryo-EM** و **X-ray crystallography** یکی از چالش‌های بزرگ بیولوژی ساختار در دههٔ اخیر بوده و تصویر آن در رزولوشن $3.2 \text{ \AA}$ مسیر کشف نقش‌های متقابل DNA-Protein را روشن کرده است.

از دید عملکردی، تغییرات در **CLOCK** و **BMAL1** نه تنها با اختلال خواب بلکه با دیابت، افسردگی فصلی و حتی پاسخ ایمنی مرتبطاند. **CLOCK** همچنین فعالیت آنزیم‌هایی در مسیر متابولیسم نیکوتین‌آمید را تنظیم می‌کند و به‌طور مستقیم با سطوح **NAD⁺** سلولی کوپل می‌شود—به این معنا که زمان و متابولیسم در یک مدار ساختاری مشترک صحبت می‌کنند.

دیدگاه محاسباتی - شبیه‌سازی ساعت مولکولی

الگوی دینامیک بین CLOCK و BMAL1 را می‌توان مانند یک پاندول درون هسته مدل کرد. با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) در بازه‌های میلی‌نانونی، تغییر زاویه و نوسان حلقه‌های PAS-A و PAS-B را می‌توان مشاهده کرد. نتایج نشان می‌دهد که دمای سلولی به صورت مستقیم روی باز و بسته شدن فضای بین PASها اثر دارد—نوعی “Time gating” مولکولی.

این تحلیل‌ها در ترکیب با داده‌های *single-cell transcriptomics* و مدل‌سازی *stochastic oscillation*، راه را برای طراحی داروهایی باز می‌کند که ریتم سلولی را بازتنظیم کنند؛ مثلاً برای درمان jet lag، یا در اختلال‌های متابولیک حاصل از کار شیفتی.

بازبرنامه‌ریزی متابولیکی و مهار تترامری‌شدن لاکتات دهیدروژناز:

رویکردی بر پایه ترکیبات طبیعی بومی ایران**

از مقاله تازه چاپ شده ما در ژورنال **Computers in Biology and Medicine**

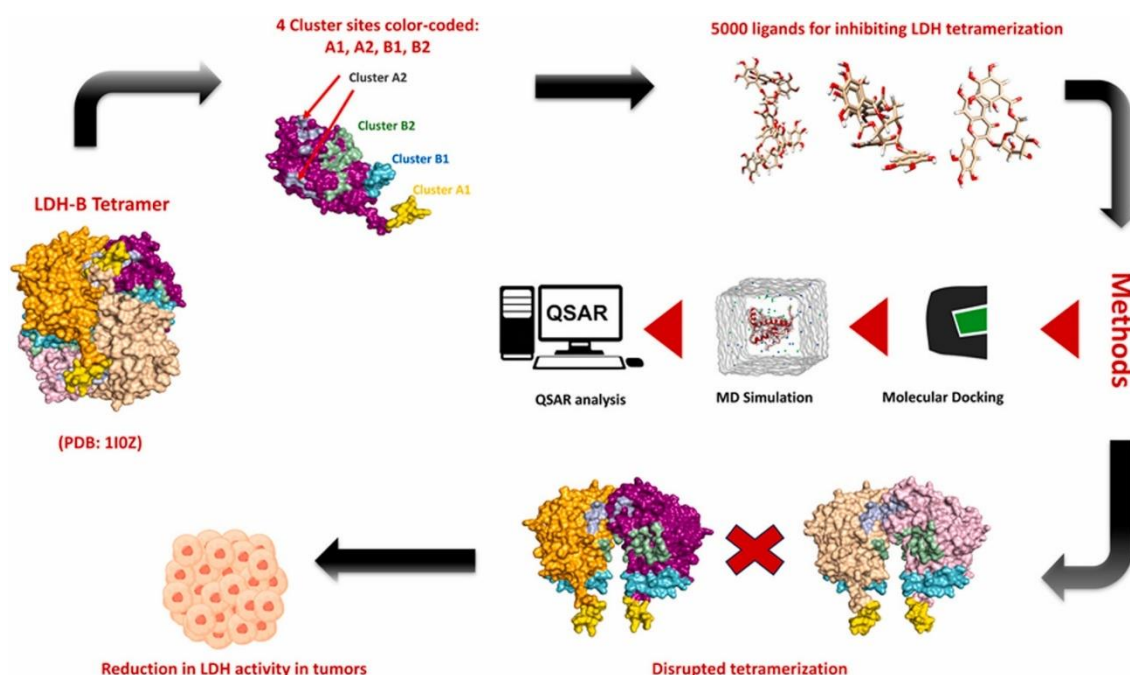
Mechanism-based targeting of lactate dehydrogenase tetramerization by naturally derived compounds: A survey of molecular docking, molecular dynamics, and QSAR analysis

توسط گروه پژوهشی بیوشیمی محاسباتی آکادمی زیستا

(دکتر دهقان‌بنادکی و دانشجویان پژوهشی آکادمی زیستا)

بازبرنامه‌ریزی متابولیکی یکی از شاخص‌های اصلی سرطان است، ویژگی‌ای که با افزایش گلیکولیز و تغییرات مسیرهای لاکتات همراه است. بخش عمده‌ای از این تغییرات به واسطه ایزوفرم‌های LDH-A/B رخ می‌دهد. لاکتات دهیدروژناز یک آنزیم چهارزیرواحدی (تترامر) است که از اتصال دو دایمر تشکیل می‌شود و در بسیاری از بافت‌های توموری بیش‌بیا می‌شود. از این رو، هدف‌گیری

فرایند تترامری شدن LDH به عنوان یک راهکار درمانی نوآورانه، توجه ویژه تحقیقات اخیر را جلب کرده است.



در این پروژه، ما، به عنوان تیم پژوهشی آکادمی زیست، بیش از ۵۰۰۰ ترکیب طبیعی فعال زیستی برگرفته از گیاهان دارویی بومی ایران را با استفاده از **Docking**، شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) و مدل **QSAR** بررسی کردیم تا امکان مهار فرایند الیگومری شدن LDH را ارزیابی کنیم. چهار خوشه کلیدی در رابط دایمر به عنوان هدف ساختاری انتخاب شدند؛ این نواحی در پایداری تترامر نقشی اساسی دارند.

شبیه سازی ها هفت ترکیب با پتانسیل مهاری قوی را شناسایی کرد. به ویژه، **Punicafolin** (از انار) و **Myricetin galloyl-hexoxide** (از سماق) کونفورماسیون های دایمر را تثبیت کرده و مانع از شکل گیری تترامر فعال شدند. تحلیل های **Principal Component** و **Correlation Dynamics** نشان داد که کاهش انعطاف پذیری در رابط دایمر عامل کلیدی مهار مؤثر است. علاوه بر این، مدل **QSAR** با ضریب $R^2 = 0.8883$ توان پیش بینی بالایی برای ارتباط ساختار-فعالیت ارائه داد.

نتایج این پژوهش نشان می دهد که تنظیم دینامیک الیگومری شدن LDH از طریق ترکیبات طبیعی ایران، مسیر تازه ای برای توسعه داروهای ضدسرطان مبتنی بر فرآورده های گیاهی می گشاید و نمونه ای از همکاری موفق میان تحلیل محاسباتی، زیست ساختار و تنوع زیستی بومی ایران است.

دوره ۴۵ ساعته آکادمی زیستا – جهان پروتئین

دوره مطالعات ساختاری و طراحی پپتید

در آکادمی زیستا – ورود به جهان پروتئین

نویسنده: دکتر نجمه دهقان بنادکی

گروه پژوهشی بیوفیزیک ساختاری-محاسباتی، آکادمی زیستا (Zista Academy)

در هر سلولی از بدن، پروتئین‌ها هستند که قصه زندگی را رقم می‌زنند. از کاتالیز واکنش‌ها گرفته تا تنظیم سیگنال‌های حیاتی، آنچه یک پروتئین را خاص می‌کند، ساختار سه‌بعدی منحصر به فرد و رفتار دینامیکی آن است. درک این ساختارها، کلید رمزگشایی از عملکرد بیولوژیکی و توسعه روش‌های درمانی نوین است.

اما در دنیای امروز، فهم این ساختارها فقط با چشم میکروسکوپ ممکن نیست؛ باید با محاسبات مولکولی وارد قلب اتم‌ها شد، همان جایی که علم ساختار به هنر طراحی تبدیل می‌شود. این حوزه ترکیبی از بیوشیمی، فیزیک آماری و علوم کامپیوتر است و نیازمند تسلط بر ابزارهای قدرتمندی است که بتوانند رفتارهای پیچیده بیومولکول‌ها را شبیه‌سازی کنند.

از تئوری تا طراحی واقعی: نگاهی عمیق به مسیر ۴۵ ساعته

دوره ۴۵ ساعته آکادمی زیستا، با تدریس دکتر نجمه دهقان بنادکی (PhD) بیوفیزیک، دانشگاه تربیت مدرس، با سابقه تحقیقاتی در دانشگاه EPFL، لوزان، سوئیس، مسیری طراحی شده است تا پژوهشگر بتواند از مشاهده علمی و استراتژیک تا بررسی دقیق و مطالعاتی ساختاری-دینامیکی واقعی بر مولکول‌های زیستی پیش برود. این دوره به گونه‌ای طراحی شده که پلی میان دانش پایه بیوشیمی و سلولی و مولکولی و مهارت‌های پیشرفته بیوانفورماتیک و شبیه‌سازی مولکولی ایجاد کند.

این دوره به صورت پروژه‌ای و کاملاً عملی، از درک ساختار پروتئین‌ها و مدل‌سازی ساختار-عملکرد آغاز می‌شود و با طراحی و شبیه‌سازی پپتیدهای نوین پایان می‌یابد. تأکید اصلی بر کاربرد عملی ابزارها و تفسیر فیزیکوشیمیایی نتایج است، نه صرفاً یادگیری Syntax نرم‌افزارها.

هدف کلیدی: تبدیل شدن از کاربر صرف ابزار به یک طراح مولکولی آگاه.

این دوره برای چه کسانی است؟

این دوره برای هر کسی که می‌خواهد از یادگیری سادهٔ نرم‌افزار فراتر برود و در پژوهش واقعی توانمند شود، ایده‌آل است:

۱. دانشجویان همه مقاطع (کارشناسی، ارشد و دکتری): دانشجویان تحصیلات تکمیلی در رشته‌های بیوشیمی، بیوفیزیک، زیست‌شناسی مولکولی، بیوتکنولوژی، نانوبیوتکنولوژی، شیمی دارویی و داروسازی که نیاز به یک بخش محاسباتی قوی در پایان‌نامه خود دارند. دانشجویان کارشناسی زیست و دکتری پزشکی و داروسازی که می‌خواهند هر چه سریع‌تر تحقیقات محاسباتی خود را شروع کرده و به مقاله برسند.
 ۲. پژوهشگران جوان (پسا دکتری): که به دنبال ساختن رزومهٔ ساختارمحور و وارد شدن به اکوسیستم جهانی «ساختار و طراحی پروتئین» هستند.
 ۳. فارغ‌التحصیلان علاقه‌مند: افرادی که می‌خواهند وارد صنایع دارویی و بیوتکنولوژی شوند و مهارت‌های مدل‌سازی مولکولی را به عنوان یک مزیت رقابتی استفاده کنند.
-

ساختار تفصیلی محتوای آموزشی (۴۵ ساعت)

دوره به دو بخش اصلی تقسیم می‌شود که هر بخش بر جنبهٔ خاصی از مدل‌سازی و شبیه‌سازی متمرکز است.

بخش اول (۲۵ ساعت): مدل‌سازی ساختاری و Docking پیشرفته و کسب توانایی طراحی پپتید

این بخش پایه و اساس درک نحوهٔ برهم‌کنش مولکول‌ها را فراهم می‌کند و تمرکز آن بر پیش‌بینی ساختار و برهم‌کنش‌های هدفمند است.

۱. مبانی پیشرفته ساختار پروتئین :

- بازبینی اصول ساختارهای دوم و سوم (آلفا هلیکس، بتا شیت، صفحات نامنظم).
- معرفی مفاهیم انرژی آزاد گیبس در تاشدگی پروتئین.
- معیارهای کیفیت ساختار و بررسی اتم‌های غیرمعمول (Disulfide Bonds, Metal Ions).

۲. مدل‌سازی ساختار Homology Modeling

- مدل‌سازی بر اساس همولوژی (Homology Modeling): استفاده از نرم‌افزار **Modeller**.
 - انتخاب الگو (Template) مناسب از PDB.
 - تراز کردن توالی (Sequence Alignment) و اهمیت آن در مدل‌سازی.
 - تولید مجموعه‌ای از مدل‌ها و انتخاب بهینه با استفاده از پارامترهای آماری.
 - مدل‌سازی پروتئین موتانت، تک زنجیره، چند زنجیره، کایمر، دی‌سلوفید دار و هترو اتم دار
 - اعتبار سنجی مدل‌های تولید شده روش همولوژی.

۳. انجام داکینگ مولکولی و تحلیل نتایج

- مقدمه‌ای بر **Docking** اصول انرژی و الگوریتم‌های جستجو (Search Algorithms).
- **Docking پروتئین-پپتید: (Peptide-Protein Docking)**
 - استفاده از ابزارهای تخصصی مانند **ClusPro** برای Docking پروتئین-پپتیدها.
 - آماده‌سازی لیگاند (پپتید) و گیرنده (پروتئین) برای Docking.
 - تحلیل و انتخاب بهترین کانفورماسیون (Cluster Analysis).
 - انجام داکینگ پروتئین و مولکول کوچک با مولگرو

۴. طراحی پپتیدهای هدفمند:

۱. طراحی پپتیدهای کایمریک (Chimeric Peptides).
۲. طراحی پپتیدهای متصل به یون فلزی (Metal-Binding Peptides) و اهمیت آن در ساختارهای کوفاکتوری.
۳. اصول طراحی پپتیدهای مهارکننده (Inhibitory Peptides) بر اساس باقی‌مانده‌های کلیدی در ناحیه فعال.

۵. اجرای یک مینی پروژه طراحی پپتید ساختار محور: شرکت کنندگان یک هدف پروتئینی (مثلاً یک گیرنده بیماری‌زا) را انتخاب کرده و بر اساس یافته‌های Docking، یک پپتید هدفمند طراحی می‌کنند.



بخش دوم (۲۰ ساعت):

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
(MD Simulation) و تحلیل

ترمودینامیکی

این بخش بر پویایی سیستم‌ها و محاسبه دقیق انرژی‌های برهم‌کنش تمرکز دارد که برای اعتبارسنجی نتایج Docking حیاتی است.

۱. محیط محاسباتی و نصب ابزارها:

- آشنایی با محیط لینوکس (Bash Scripting) ضروری برای مدیریت پروژه‌های شبیه‌سازی.
- نصب و راه‌اندازی بسته‌های قدرتمند: MD

۲. اجرای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی روی دیتای واقعی

- آماده‌سازی سیستم برای: MD
 - تعبیه ساختار Dock شده در محیط آب. (Solvation)
 - خنثی‌سازی بار الکتریکی با افزودن یون‌ها. (Ion Placement)
 - مراحل بهینه‌سازی (Minimization) و تعادل‌سازی – (Equilibration) مرحله کنترل دما و فشار.
- اجرای MD واقعی: اجرای شبیه‌سازی‌های طولانی‌مدت (نانوثانیه) روی سیستم پپتید-پروتئین، پپتید به تنهایی، پروتئین-لیگاند و پروتئین-پروتئین
 - تعیین پارامترهای دما (NVT) و فشار. (NPT)

۳. تحلیل پویایی سیستم و ترمودینامیک:

- تحلیل ساختاری پویایی:
- آموزش بیش از ده آنالیز با تحلیل
- محاسبه انرژی اتصال با روش‌های پیشرفته:
- استفاده از روش $\Delta G_{\text{binding}}$ محاسبه شده با MM/PBSA
- محاسبه انرژی آزاد اتصال در فاز محلول
- تحلیل سهم رزیدوها: (Residue Contribution Analysis) استفاده از MM/PBSA برای شناسایی دقیق‌تر اسیدهای آمینه کلیدی که بیشترین انرژی اتصال را فراهم می‌کنند $\Delta G_{\text{binding}} = \Delta E_{\text{MM}} + [\Delta G_{\text{solv}} - T\Delta S]$
- تفسیر کامل خروجی‌ها و تبدیل داده‌های خام به نتایج علمی قابل ارائه.

دستاوردهای شما: پژوهشگر ساختارمحور

در پایان دوره ۴۵ ساعته، شما مجموعه‌ای از مهارت‌های عملی و درک عمیق خواهید داشت که شما را برای ورود به پروژه‌های پژوهشی سطح بالا آماده می‌سازد:

- ✓ **مدل‌سازی و تحلیل ساختاری:** می‌توانید ساختارهای پروتئینی با دقت بالا را مدل‌سازی کرده و آن‌ها را از منظر بیوفیزیکی تحلیل کنید.
- ✓ **اجرای کامل Docking:** توانایی اجرای Docking در سطوح مختلف پیچیدگی (از ساده تا مبتنی بر شواهد) و انتخاب الگوریتم مناسب برای مسئله خاص. ✓ **شبیه‌سازی دینامیک مولکولی:** خودتان می‌توانید یک سیستم پپتید-پروتئین را پیکربندی کرده، شبیه‌سازی را اجرا نموده و پایداری آن را تحلیل کنید. ✓ **تفسیر ترمودینامیکی:** قادر خواهید بود انرژی اتصال را با روش‌های دقیق (MM/PBSA) محاسبه و مهم‌ترین برهم‌کنش‌های مولکولی را شناسایی کنید. ✓ **خروجی پژوهشی:** خروجی پژوهشی باکیفیت و قابل چاپ (شامل نمودارهای RMSD، تصاویر ساختاری با کیفیت بالا و جداول انرژی برای رزومه یا مقاله خواهید داشت). ✓ **آمادگی بین‌المللی:** آماده حضور در پژوهش‌های بین‌المللی جهان پروتئین می‌شوید که عموماً بر پایه کار با داده‌های RCSB بنا شده‌اند.

پوشش عملی: RCSB

بانک جهانی ساختارهای پروتئینی (RCSB (PDB بیش از ۲۳۰ هزار ورودی دارد. پس از گذراندن کامل این دوره، شایستگی کار عملی روی حدود ۷۰٪ این مجموعه، یعنی نزدیک به ۱۶۰ هزار ساختار پروتئینی، به‌دست خواهید آورد — از مدل‌سازی اولیه و Docking تا شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

سیستم‌های پیچیده. این دامنهٔ دسترسی، شما را قادر می‌سازد وارد پروژه‌های بین‌المللی شوید که بر پایهٔ داده‌های واقعی RCSB اجرا می‌شوند.

چرا آکادمی زیستا؟

زیستا از صفر تا پروژهٔ نهایی در کنار تان است. ما درک می‌کنیم که تفاوت یک دورهٔ آموزشی با یک دورهٔ توانمندسازی، در سطح پشتیبانی و پروژه‌محوری آن است.

- پشتیبانی علمی مستقیم: دسترسی مستقیم به مدرس دوره برای رفع اشکالات عمیق بیوشیمیایی و محاسباتی.
- رویکرد تحلیلی: آموزش فقط نرم‌افزار نیست؛ آموزش این است که بدانید چرا یک پارامتر را تنظیم می‌کنید و چه معنایی در فیزیک مولکولی دارد.
- مشاوره پژوهشی: راهنمایی گام به گام برای تبدیل نتایج نهایی دوره به یک پروژه قابل انتشار یا بخشی مستند از پایان‌نامه.

هدف این دوره صرفاً آموزش نیست – تبدیل دانشجو به پژوهشگر حرفه‌ای در جهان پروتئین است.

ثبت‌نام و اطلاعات بیشتر:

تلگرام @zista_Academy_real

تا ده آبان ۵۰ تا ۶۰ درصد تخفیف

آکادمی زیستا – جایی برای ساختن آینده‌ای ساختارمحور
جهان پروتئین، جایی برای آغاز قدرتمند مسیر شما



آکادمی زیستا
ISTA ACADEMY

شماره 2

زیستا ساختار

از دینامیک تا طراحی محاسباتی

- نوبل از دریچه بیولوژی ساختار
- مولکول ماه - CLOCK protein
- ایده های محاسباتی روی CLOCK
- گیاهان بومی ایران و سرطان
- جهان پروتئینی با زیستا