

TEXNIK TIZIMLARDA AXBOROT TEXNOLOGIYALARI

1. MD simulyatsiyasida hosil bo'lgan koordinatalarni qanday vizualizatsiya qilish mumkin?
2. GROMACS dasturida eng ko'p qo'llaniladigan suv modellari (masalan, SPC, TIP3P, TIP4P) orasidagi asosiy farqlar nimalardan iborat?
3. Suv modellarini molekulyar dinamika simulyatsiyalarida tanlash qanday sharoitlarga va tadqiqot maqsadlariga bog'liq?
4. Model sistemada zichlik qanday o'lchanadi?
5. Bog'langan va bog'lanmagan potentsiallar qanday hisoblanadi?
6. Suv sistemasiga ionlarni qanday qo'shiladi va ionlarning miqdorini qanday belgilash mumkin?
7. Ionlarni qo'shgandan so'ng, sistemada ion-suv va ion-ion o'zaro ta'sirlarini qanday tahlil qilish mumkin?
8. Metan molekulasi uchun erkin energiyani hisoblashda qanday yondashuvlar qo'llaniladi va GROMACS'da qaysi metodlar eng samarali hisoblanadi?
9. Erkin energiya hisoblashda GROMACS mdp faylida qaysi parametrlarga alohida e'tibor qaratish lozim?
10. Metan molekulasi uchun erkin energiya profili qanday fizik xususiyatlarni tahlil qilishda yordam beradi?
11. Ikki fazali sistemalarni hosil qilish. Siklogeksan va suv molekularining model sistema bo'ylab joylashuvini qanday ajratish mumkin?
12. Packmol yordamida fosfolipid membrana modelini yaratishda qanday asosiy qadamlar amalga oshiriladi va dasturda qaysi parametrlar e'tiborga olinadi?
13. Fosfolipid membranani hosil qilishda Packmol yordamida suv molekularini fosfolipidlar bilan qanday o'zaro taqsimlash mumkin?
14. Packmol qanday ishga tushiriladi va qanday turdagi fayllarni generatsiya qiladi?
15. CHARMM-GUI yordamida molekular tizimini qurishda qaysi bosqichlar amalga oshiriladi va qanday parametrlarni tanlash kerak?

16. PyMOLda molekula strukturasi vizualizatsiya qilishda qanday asosiy komandalar ishlatiladi va ular qanday afzalliklarni beradi?
17. PyMOLda o'zgartirilgan molekula strukturasi qanday eksport qilish va boshqa dasturlarda ishlatish mumkin?
18. PyMOLda molekula ko'rinishi qanday o'zgartiriladi. Rasmlar qanday tayyorlanadi?
19. Oqsil-strukturaviy barqarorlikni tahlil qilishda RMSD grafiklarining interpretatsiyasi qanday bo'ladi?
20. GROMACS dasturida oqsil modellashtirish jarayonini bosqichma-bosqich tushuntiring.
21. Oqsillarni modellashtirishda nima uchun suv bilan muvozanatlash zarur?
22. RMSD (Root Mean Square Deviation) nima va u qanday analiz qilinadi?
23. RMSF (Root Mean Square Fluctuation) nima va u modellashtirish natijalarida qanday ma'lumot beradi?
24. Vodorod bog'larining tahlili oqsillar dinamikasida qanday ahamiyatga ega?
25. GROMACSda MD (Molecular Dynamics) simulyatsiyasini ishga tushirish uchun qanday asosiy fayllar kerak bo'ladi?
26. MD simulyatsiyasi natijasida olingan trajektoriyalarni vizualizatsiya qilish uchun qaysi dasturlar ishlatiladi?
27. Oqsil-strukturaviy barqarorlikni tahlil qilishda RMSD grafiklarining interpretatsiyasi qanday bo'ladi?
28. RMSF orqali oqsilning qaysi qismi eng mobil ekanligini qanday aniqlash mumkin?
29. Molekula va oqsil ta'sirlashuvida erkin energiya profillari tahlili qanday amalga oshiriladi?
30. Topologiya fayli (topology file) nima va u qanday yaratiladi?
31. Oqsilning boshlang'ich strukturasi PDB formatida bo'lsa, uni GROMACSGa mos formatga qanday o'tkaziladi?

32. Energiya minimallashtirish jarayonida qanday muammolar yuzaga kelishi mumkin va ularni qanday hal qilish mumkin?
33. DFTB+ dasturida Tight-Binding metodining asosiy prinsiplari qanday va u kvant mexanik hisoblashlarda qanday afzalliklarni beradi?
34. Oqsilning konformatsion o'zgarishlarini qanday kuzatish va tahlil qilish mumkin?
35. Oqsilning ikkilamchi strukturaviy elementlarini qanday aniqlash va vizualizatsiya qilish mumkin?
36. FTSite serverida oqsil molekulasining ligand bog'lanish joylarini aniqlash qanday amalga oshiriladi va ushbu usulning afzalliklari nimada?
37. FTSite serveridan olingan natijalar molekulyar docking yoki boshqa bog'lanish tahlillari uchun qanday ishlatiladi?
38. ATB serverida yangi molekula uchun topologiya faylini yaratish jarayonida qaysi ma'lumotlarni kiritish kerak va qanday parametrlarni belgilash lozim?
39. AutoDock Vina dasturida oqsil va ligandni tayyorlash uchun qanday qadamlar amalga oshiriladi va qaysi formatlar talab etiladi?
40. AutoDock Vina dasturida docking natijalarini qanday tahlil qilish va eng yaxshi bog'langan holatni aniqlash mumkin?