

Тема
выпускной
квалификационной
работы:

Исследование визуально-графических принципов и форм коммуникации в веб-среде: на примере разработки ресурса для лаборатории нанобиотехнологий и химической биологии

Руководитель теоретической части:
Васильева Е.В.

Руководитель практической части:
Старцев К.Г.

Автор проекта:
Королева Александра

Задачи исследования:

- Рассмотреть графическую систему XX века.
- Произвести анализ существующих ресурсов как объектов дизайна и источников информации.
- Рассмотреть возможные формы организации текстового и графического контента.
- Выделить основные методы подачи информации в виртуальной среде и определить их концептуальные и функциональные особенности.

*Основное
направление
лаборатории:*

- применение методов компьютерного моделирования
- разработка новых алгоритмов для фундаментальных научных задач (исследование белков в бактериях/ насекомых/ млекопитающих, для определения механизмов сложных химических реакций, для моделирования горения топлив в реактивных двигателях)

Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж.И. Алфёрова Российской академии наук



Лаборатория NCB group:

1. визуальный стиль лаборатории, отличающийся от других научных групп
2. информационный ресурс в виртуальной среде
3. функциональная форма подачи научного материала для целевой аудитории

Цели и задачи:

- создать ресурс в виртуальной среде, обеспечивающий продвижение научных исследований лаборатории

- Рассмотреть визуальные принципы научно-образовательных веб-ресурсов.
- Структурировать информацию по данному направлению и представить ее в единой системе.
- Разработать и реализовать концепцию проекта.

Целевая аудитория:

1 группа

- Сотрудники лаборатории

2 группа

- Ученые, исследователи
- Студенты университета

3 группа

- Лица, заинтересованные в продвижении научных разработок и новых технологий

Состав проекта:

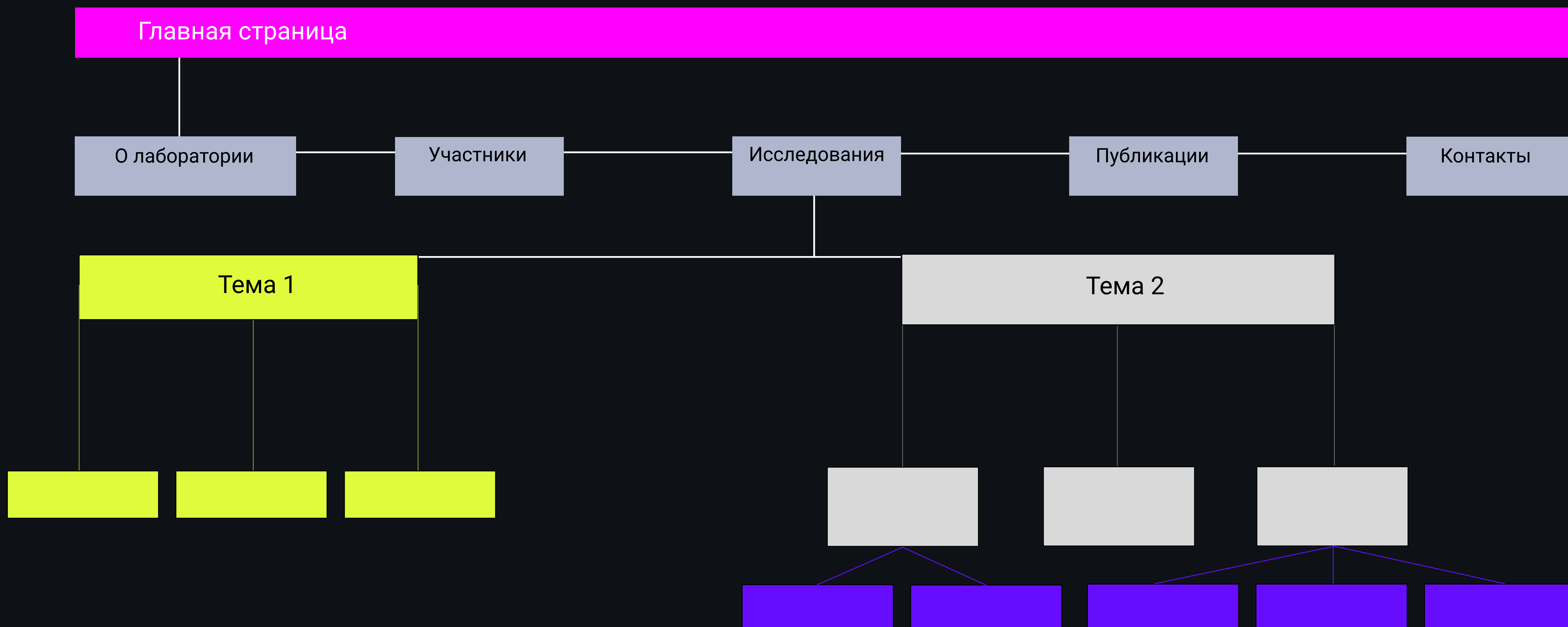
- **Логотип лаборатории**
- **Дизайн и разработка сайта-презентации**
- **3D визуализация и инфографика научных данных**
- **Шаблоны для презентации**
- **Создание и дизайн презентации для научного доклада**
- **Серия плакатов**
- **Видеозаставки**

Логотип:



*В логотипе заложена основная идея
формообразования всего графического
стиля научной лаборатории*

Структура сайта-презентации:



Презентация научного доклада:

18th International Conference on Retinal Proteins

Computational Models for Rhodopsins: from Primary Structures to Optical Properties

Mikhail N. Ryazantsev

2020

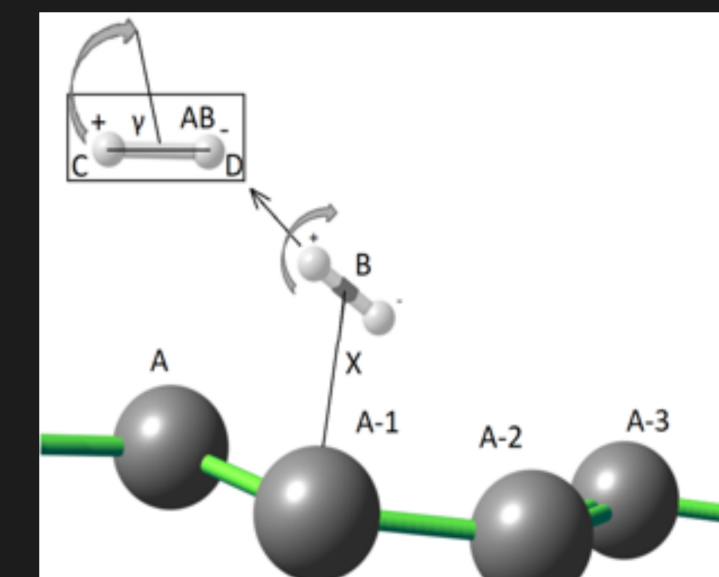
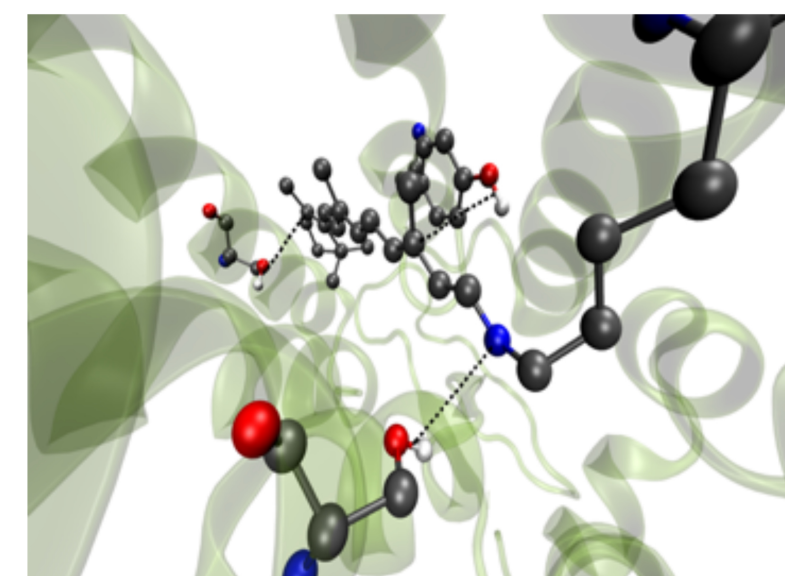
Saint-Petersburg State University



VALIDATION AGAINST SPECTRAL PROPERTIES



The effect of polar residues on λ_{max}



14

VALIDATION OF PREDICTED MODEL AGAINST PROTEIN X-RAY STRUCTURE



To unambiguously evaluate the quality of homology models we produced models only for rhodopsins whose structure has been determined experimentally.

In this way, we could compare the resulting model with the corresponding experimental structure using common metrics (RMSD, GDT-HA).

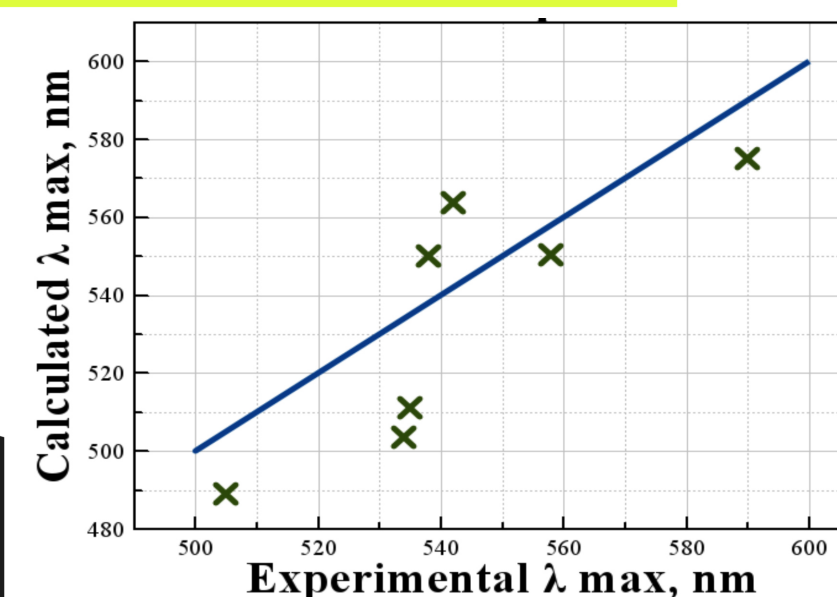
In our study we formed pairs of experimental structures (A and B), and predicted structure of A using structure of B as a template and vice versa.

6

ABSORPTION MAXIMA FOR RHODOPSINS WITH NO X-RAY STRUCTURE AVAILABLE



Bacteriorhodopsin cluster



$\langle |d\lambda| \rangle = 18.0$ nm

$\max |d\lambda| = 30.6$ nm

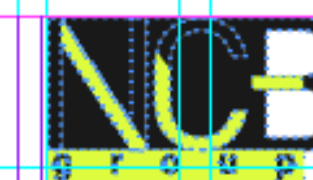
Rhodopsins:

L. maculans rh.,
N. crassa rh.,
G. theta rh.,
archaerhodopsin-3,
QuasAr1,
R. laticola rhodopsin,
G. violaceus rhodopsin.

23

Шаблон презентации:

ЗАГОЛОВОК / *Roboto Bold Italic 61 pt*



Подзаголовок / *Roboto Regular 50 pt*

Roboto Medium Italic 40 pt

Roboto Medium 40 pt

Roboto Medium 25 pt

Сноски / *Roboto Light Italic 27 pt*

A

Плакаты:

NCB Nano -
bio -
technologies

Chemical
Biology



group

Alferov University

2020

hybrid QM/MM
computational chemistry
molecular mechanics
rhodopsins
new nanobiosensors
SOFTWARE and algorithms
molecular mechanics

ncb_group@gmail.com
<https://spbau.ru/>



www.NCB_group.com

Nano -
bio - *
technologies

Chemical
Biology

group



www.NCB_group.com

Плакаты:

Nanobiotechnologies & Chemical Biology group

2020

Alferov University

NCB group

hybrid QM/MM computational chemistry molecular mechanics rhodopsins new nanobiosensors SOFTWARE and algorithms

www.ncb_group.com

NCB group focus on applying machine learning methods to extend the capabilities of molecular modeling algorithms and to increase the accuracy of models.

**Nano-
biotechnologies & Biocemical group**

2020

12.09 12:15

Molecular Simulations and Solid-State NMR Investigate Dynamical Structure in Rhodopsin Activation

MEMBERS
Mikhail N. Ryazantsev
Dmitrii M. Nikolaev

Andrey A. Shtyrov
Danil M. Strashkov

NCB AV

NCB group focus on applying machine learning methods to extend the capabilities of molecular modeling algorithms and to increase the accuracy of models.

hybrid QM/MM computational chemistry molecular mechanics rhodopsins new nanobiosensors SOFTWARE and algorithms

Nanobiotechnologies & Chemical Biology group

Alferov University
https://spbau.ru/ 8/3A Khlopina street, Saint - Petersburg, Russia

NCB
The academic University is the only University in Russia that was founded by the Nobel prize-winner in physics - academician Zhores Alferov, the founder of a new model of scientific staff training: from high school to graduate school.

MEMBERS:
Mikhail N. Ryazantsev
Dmitrii M. Nikolaev
Andrey A. Shtyrov
Danil M. Strashkov


ncb.group@gmail.com
www.NCB_group.com

NCB Nano - bio - technologies Chemical Biology group

Alferov University

2020

MEMBERS
hybrid QM/MM
computational chemistry
molecular mechanics
molecular dynamics
new nanosensors
SOFTWARE and algorithms
molecular mechanics



Nano - bio - technologies Chemical Biology group

NCB group focus on applying machine learning methods to extend the capabilities of molecular modeling algorithms and to increase the accuracy of models.

Alferov University

www.ncb_group.com

NCB




NCB Nano - bio - technologies Chemical Biology group

Alferov University

2020

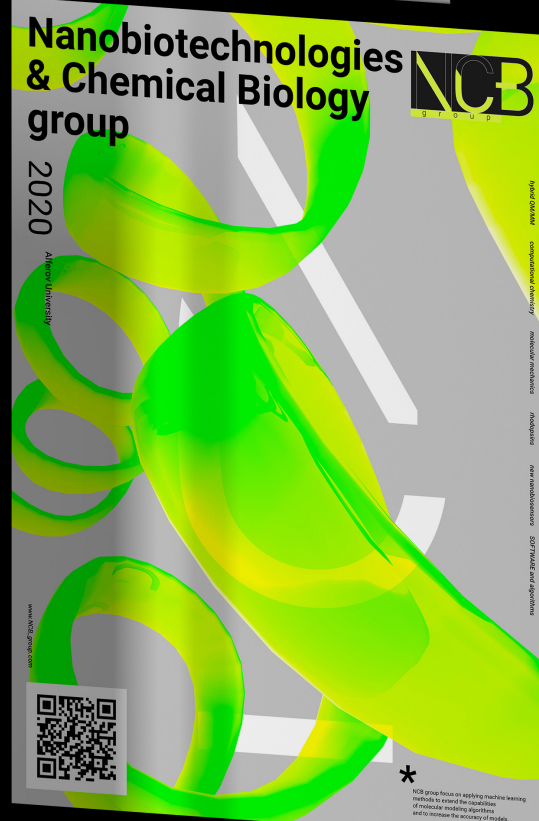
MEMBERS
hybrid QM/MM
computational chemistry
molecular mechanics
molecular dynamics
new nanosensors
SOFTWARE and algorithms
molecular mechanics




Nanobiotechnologies & Chemical Biology group

2020

NCB



MEMBERS
hybrid QM/MM
computational chemistry
molecular mechanics
molecular dynamics
new nanosensors
SOFTWARE and algorithms
molecular mechanics




NCB Nano - bio - technologies Chemical Biology group

Alferov University

2020

MEMBERS
hybrid QM/MM
computational chemistry
molecular mechanics
molecular dynamics
new nanosensors
SOFTWARE and algorithms
molecular mechanics



Nanobiotechnologies & Chemical Biology group

Alferov University

NCB



MEMBERS
hybrid QM/MM
computational chemistry
molecular mechanics
molecular dynamics
new nanosensors
SOFTWARE and algorithms
molecular mechanics



Nano-^{*}bio-technologies & Chemical Biology
 2020

* NCB group focus on applying machine learning methods to extend the capabilities of molecular modeling algorithms and to increase the accuracy of models.

12.09
 12:15

Molecular Simulations and Solid-State NMR Investigate Dynamical Structure in Rhodopsin Activation

MEMBERS
 Mikhail N. Ryzantsev
 Dmitrii M. Nikolaev
 Andrey A. Steysov
 Daniil M. Streshkov

Nanobiotechnologies & Chemical Biology group
 Aifarov University
 NCB
 AV

