

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie struktury białczątek, PG_00156403						
Kierunek studiów	Bioinformatyka (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2026/2027		
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie		Grupa zajęć		Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	3		Język wykładowy		polski polski		
Semestr studiów	5		Liczba punktów ECTS		5.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		egzamin		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii Teoretycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr Magdalena Ślusarz				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	60.0	0.0	0.0	75
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	75		0.0		50.0	125
Cel przedmiotu	Zapoznanie studentów z technikami i narzędziami chemii obliczeniowej ze szczególnym uwzględnieniem modelowania białek oraz dokowania molekularnego.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[BIOINL3_U03] Stosuje podstawowe metody matematyczne i statystyczne do opisu zjawisk i analizy danych; posiada umiejętność podstawowej analizy danych w profesjonalnych bazach danych wykorzystywanych w bioinformatyce	Student wybiera odpowiednią metodę chemii obliczeniowej do rozwiązania postawionego przed nim problemu. Analizuje wyniki symulacji komputerowych z wykorzystaniem gotowych oraz samodzielnie napisanych programów. Porównuje wyniki obliczeń z danymi eksperymentalnymi. Parametryzuje empiryczne pole siłowe z wykorzystaniem obliczeń <i>ab initio</i> . Przewiduje struktury białek i ich kompleksów z wykorzystaniem wybranych programów, portali internetowych oraz baz struktur chemicznych. Potrafi wykorzystać wyniki eksperymentów CASP oraz CAPRI, oceniających skuteczność teoretycznych metod przewidywania struktur białek i ich kompleksów, do wyboru stosowanych metod obliczeniowych.	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport [SU5] realizacja zadania problemowego [SU6] demonstracja umiejętności praktycznych
	[BIOINL3_U02] Potrafi zastosować wiedzę z nauk przyrodniczych i ścisłych do formułowania, analizowania i rozwiązywania problemów związanych z bioinformatyką	Student dokonuje wyboru odpowiedniej metody chemii obliczeniowej do rozwiązania problemu badawczego z dziedziny nauk ścisłych i przyrodniczych. W tym celu potrafi zastosować różne metody wizualizacji struktury i dynamiki białek oraz innych biomolekuł. Analizuje wyniki symulacji komputerowych z wykorzystaniem wiedzy z nauk przyrodniczych i ścisłych oraz porównuje uzyskane wyniki obliczeń z danymi eksperymentalnymi.	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja [SU2] prezentacja/projekt/referat/raport [SU5] realizacja zadania problemowego [SU8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta
	[BIOINL3_W04] Ma wiedzę w zakresie podstawowych technik i narzędzi badawczych stosowanych w bioinformatyce	Student nazywa i opisuje podstawowe metody modelowania molekularnego. Rozróżnia metody chemii kwantowej od metod mechaniki molekularnej oraz deterministyczne i stochastyczne metody symulacji komputerowych. Charakteryzuje przybliżenia wykorzystane w empirycznych polach siłowych. Rozróżnia modele pełnoatomowe od gruboziarnistych, zna ich wady i zalety. Zna podstawy dokowania molekularnego. Zna metody przewidywania struktur białek i ich kompleksów. Opisuje na czym polegają eksperymenty oceniające skuteczność teoretycznych metod przewidywania struktur białek (Critical Assessment of protein Structure Prediction = CASP) i ich kompleksów (Critical Assessment of PRediction of Interactions = CAPRI).	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[BIOINL3_W02] Ma wiedzę z nauk ścisłych i przyrodniczych niezbędną do zrozumienia podstaw funkcjonowania organizmów żywych	Student nazywa, rozpoznaje i wizualizuje strukturę białek i ich znaczenie biologiczne w funkcjonowaniu organizmów żywych. Opisuje zależności pomiędzy strukturą i aktywnością biomolekuł oraz ich kompleksów.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja
Treści przedmiotu	Wizualizacja struktury i dynamiki białek oraz innych makrocząsteczek (z wykorzystaniem programów Pymol, Chimera, Vmd). Symulacje dynamiki molekularnej w modelu pełnoatomowym (programy z pakietów Amber i Gromacs) i gruboziarnistym (modele UNRES, Martini). Dokowanie molekularne (program AutoDock Vina). Parametryzacja empirycznych pól siłowych dla ligandów i aminokwasów niebiałkowych z wykorzystaniem metod chemii kwantowej (antechamber z pakietu Amber, obliczenia <i>ab initio</i> w programach Gamess i Gaussian). Przewidywanie struktury białek i ich kompleksów; przedstawienie eksperymentów CASP i CAPRI. Wykorzystanie programów i portali internetowych do przewidywania struktur białek, takich jak Modeller, I-TASSER, UNRES-server, ClusPro, UNRES-Dock, CABS-dock. Wykorzystanie programów w języku Python do opracowania i wizualizacji wyników obliczeń i symulacji.		

Wymagania wstępne i dodatkowe	Wymaganie wstępne: - Umiejętność pracy w systemie Unix - Umiejętność programowania w języku Python Wymagania formalne: - Python z podstawami algorytmiki - Metody numeryczne dla bioinformatyków - Metody matematyczne bioinformatyki		
Sposoby i kryteria oceniania osiąganych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Ocena z wykładu wystawiana jest na podstawie egzaminu (test wielokrotnego wyboru zawierający również zadania otwarte).	51.0%	20.0%
	Ocena z ćwiczeń laboratoryjnych jest średnią arytmetyczną ocen otrzymanych z poszczególnych sprawozdań obejmujących wykonywane w trakcie semestru ćwiczenia.	51.0%	80.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Brak	
	Uzupełniająca lista lektur	- Chemia medyczna. P. Graham, PWN, 2019; 978-83-01-20812-7, Rozdz.17: <i>Komputery w chemii medycznej</i> - Chemia obliczeniowa. J. Harvey, PWN 2019, 978-83-01-20696-3 - Wprowadzenie do Bioinformatyki, A. Lesk, PWN, 2019, 978-83-01-20963-6, Rozdz. 5: <i>Bioinformatyka strukturalna a opracowanie leków</i>	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	- Budowa modeli cząsteczek w programie Molden - Wizualizacja struktur białek w programie Pymol - Dokowanie liganda do białka w programie AutoDock		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.