Uniwersytet Gdański

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Podstawy modelowania molekularnego, PG_00193186		
Kierunek studiów	Biotechnologia (O)		
Data rozpoczęcia studiów	październik 2025 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu	2025/2026
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie	Grupa zajęć	Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji	na uczelni
Rok studiów	1	Język wykładowy	polski
Semestr studiów	2	Liczba punktów ECTS	2.0
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia	zaliczenie
Jednostka prowadząca	Rektor -> Międzyuczelniany Wydział Biotechnologii UG i GUMed -> Instytut Biotechnologii UG -> Pracownia Biofizyki		
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. Rajmund Kaźmierkiewicz, prof. UG	
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr hab. Rajmund Kaźmierkiewicz, prof. UG	

Formy zajęć

Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	15.0	0.0	0.0	30
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	30	0.0	0.0	30

Cel przedmiotu

Celem przedmiotu jest zapoznanie uczestników kursu z praktycznymi informacjami na temat tworzenia komputerowych modeli cząsteczek chemicznych, zdobycie przez nich umiejętności posługiwania się dostępnymi programami, czytanie ze zrozumieniem instrukcji programów, umiejętność planowania czynności prowadzących do utworzenia realistycznego modelu teoretycznego zjawiska zachodzącego w komórce, umiejętność krytycznej oceny i weryfikacji wyników.

Efekty uczenia się przedmiotu

Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
[BIOTECHL3_U03] Stosuje metody matematyczne i statystyczne do opisu zjawisk i analizy danych oraz potrafi wykorzystywać profesjonalne bazy danych stosowane w biotechnologii.	Uczestnik kursu potrafi zastosować podstawowe metody stosowane do modelowania cząsteczek. Potrafi dokować małe cząsteczki i tworzyć modele kompleksów białek oraz białek z kwasami nukleinowymi. Posiada również umiejętność analizy wyników dynamiki molekularnej.	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny

Treści przedmiotu	Zapoznanie z możliwościami systemu Linux oraz z programami i elementarnymi pojęciami dotyczącymi konstruowania, zapisywania, odczytywania i manipulowania modelami cząsteczek używanymi w Mechanice Molekularnej. Liczenie potencjału elektrostatycznego, minimalizacja energii (optymalizacja struktur startowych cząsteczek), użycie uproszczonej funkcji energii potencjalnej (ang. soft potential). w polu sił ECEPP/3, Zastosowania metody dynamiki molekularnej w polu sił AMBER. Metoda Monte-Carlo, analiza skupień dla dużej liczby konformacji. Zastosowanie analizy drgań normalnych cząsteczek. Dokowanie małych cząsteczek i tworzenie modeli kompleksów białek oraz białek z kwasami nukleinowymi. Dynamika molekularna z użyciem ograniczeń swobody konformacyjnej pochodzących z wyników badań doświadczalnych (ang. restrains,constrains). Minimalizacja i Simulated annealing. Użycie funkcji kary (ang. penalty function). Szczegółowa analiza wyników dynamiki molekularnej.
Wymagania wstępne i dodatkowe	Wymagana jest podstawowa umiejętność obsługi komputera

Sposoby i kryteria oceniania osiąganych efektów uczenia się

Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
Sprawdzian pisemny z pytaniami otwartymi i testowymi	51.0%	50.0%
10 sprawozdań z ćwiczeń	51.0%	50.0%

Zalecana lista lektur

Podstawowa lista lektur	Skrypt, "INTRODUCTION TO MOLECULAR MODELING", Rajmund Kaźmierkiewicz, Intercollegiate Faculty of Biotechnology UG-MUG, Gdańsk 2011
Uzupełniająca lista lektur	Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications (Second Edition), Daan Frenkel
Adresy eZasobów	

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania

1. Co to jest współrzędna wewnętrzna cząsteczki ?
2. Wyjaśnij pojęcie nakładanie sekwencji białek.
3. Jakiej liczby współrzędnych wewnętrznych należy użyć do pełnego opisu: a) odległości (długości wiązań), b) kątów walencyjnych, c) kątów torsyjnych w cząsteczce metanu?
4. Jakiego programu można użyć do przetłumaczenia współrzędnych kartezjańskich cząsteczki na jej współrzędne wewnętrzne?
5. Co rozumiesz pod pojęciem konformacja cząsteczki np. białka?
6. Zaproponuj co najmniej dwa sposoby doświadczalnej weryfikacji poprawności przewidywań konformacji dowolnej cząsteczki.
7. Wyjaśnij pojęcie empiryczne pole sił.
8. Do czego może być przydatna (w modelowaniu molekularnym) tak zwana baza standardowych reszt, która zwykle jest dołączana do pola sił?
9. Jakie znasz przykładowe nazwy empirycznych pól siłowych, czym różnią się funkcje opisujące energię potencjalną cząsteczek w tych polach sił?
10. W jakim znaczeniu używa się w mechanice molekularnej pojęcia mapka energii, jaki ma ona związek z wykresem Ramachandrana?
11. Wyjaśnij pojęcie mapa kontaktów pomiędzy atomami węgla C^a, stosowane do alternatywnego opisu konformacji białka.
12. Co to jest oddziaływanie wiążące?
13. Co to jest oddziaływanie niewiążące?
14. W jakim celu używa się tak zwany efektywny zasięg oddziaływań (*ang. cut-off)* w mechanice molekularnej?
15. Jeden ze składników energii oddziaływań niewiążących opisuje się często za pomocą wzoru Van der Waalsa. Napisz go i wyjaśnij znaczenie występujących w nim symboli.
16. Napisz wzór opisujący energię potencjalną dowolnej cząsteczki np. wody.
17. Wymień trzy rodzaje parametrów pola sił, podaj ich krótki opis.
18. Co rozumiesz pod pojęciem ograniczenia swobody konformacyjnej ?
19. Na czym polegają problemy z poprawnym uwzględnieniem oddziaływań elektrostatycznych w mechanice molekularnej?
20. Wyjaśnij na czym polega minimalizacja energii układu fizycznego np. cząsteczki?
21. Na czym polega stosowana w mechanice molekularnej metoda gradientów sprzężonych?
22. Czym różnią się minima lokalne na powierzchni opisywanej funkcją energii od jej minimum globalnego?

Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.