Uniwersytet Gdański

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie struktury biocząstek, PG_00193531						
Kierunek studiów	Bioinformatyka (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2026 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu	2028/2029			
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie		Grupa zajęć	Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki			
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji	na uczelni			
Rok studiów	3		Język wykładowy	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 hab. 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_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/ dyskusja [SU2] prezentacja/projekt/referat/ raport [SU5] realizacja zadania problemowego [SU8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta
	[BIOINL3_U03] Stosuje metody matematyczne i statystyczne do opisu zjawisk i analizy danych; posiada umiejętność 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 ab initio. 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_W02] Ma zaawansowaną wiedzę z nauk ścisłych i przyrodniczych niezbędną do zrozumienia podstaw funkcjonowania organizmów żywych	Student nazywa, rozpoznaje i wizualizuje struktury biocząsteczek oraz opisuje 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/ dyskusja
	[BIOINL3_W04] Ma zaawansowaną wiedzę w zakresie 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
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 *ab initio* 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.		

<table>
<tr><td>Wymagania wstępne i dodatkowe</td><td>Wymaganie wstępne:

• Umiejętność pracy w systemie Unix
• Umiejętność programowania w języku Python

Wymagania formalne:

• Python z podstawami algorytmiki
• Metody numeryczne dla bioinformatyków
• Metody matematyczne bioiformatyki</td></tr>
<tr><td>Sposoby i kryteria oceniania osiąganych efektów uczenia się</td><td><table>
<tr><th>Sposób oceniania (składowe)</th><th>Próg zaliczeniowy</th><th>Składowa oceny końcowej</th></tr>
<tr><td>Ocena z ćwiczeń laboratoryjnych jest średnią arytmetyczną ocen otrzymanych z poszczególnych sprawozdań obejmujących wykonywane w trakcie semestru ćwiczenia.</td><td>51.0%</td><td>80.0%</td></tr>
<tr><td>Ocena z wykładu wystawiana jest na podstawie egzaminu (test wielokrotengo wyboru zawierający również zadania otwarte).</td><td>51.0%</td><td>20.0%</td></tr>
</table></td></tr>
<tr><td rowspan="3">Zalecana lista lektur</td><td>Podstawowa lista lektur</td><td>Brak</td></tr>
<tr><td>Uzupełniająca lista lektur</td><td>• Chemia medyczna. P. Graham, PWN, 2019; 978-83-01-20812-7, Rozdz.17: Komputery w chemii medycznej
• 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: Bioinformatyka strukturalna a opracowanie leków</td></tr>
<tr><td>Adresy eZasobów</td><td></td></tr>
<tr><td>Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania</td><td colspan="2">• Budowa modeli cząsteczek w programie Molden
• Wizualizacja struktur białek w programie Pymol
• Dokowanie liganda do białka w programie AutoDock</td></tr>
<tr><td>Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu</td><td colspan="2">Nie dotyczy</td></tr>
</table>

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.