



## KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Modelowanie molekularne biocząsteczek [S2Bioinf1>MMB]

### Przedmiot

Kierunek studiów  
Bioinformatyka

Rok/Semestr  
2/4

Studia w zakresie (specjalność)  
–

Profil studiów  
ogólnoakademicki

Poziom studiów  
drugiego stopnia

Język oferowanego przedmiotu  
polski

Forma studiów  
stacjonarne

Wymagalność  
obieralny

### Liczba godzin

Wykład  
15

Laboratorium  
15

Inne (np. online)  
0

Ćwiczenia  
0

Projekty/seminaria  
0

### Liczba punktów ECTS

2,00

### Koordynatorzy

dr inż. Łukasz Ławniczak  
lukasz.lawniczak@put.poznan.pl

### Wykładowcy

### Wymagania wstępne

Na etapie rozpoczęcia zajęć student powinien posiadać podstawową wiedzę w zakresie modelowania molekularnego (np. tworzenie modeli prostych i złożonych cząsteczek, optymalizacja geometryczna) oraz relacji struktura-energia (np. wpływ zmiany konformacji oraz wiązań wodorowy na energię układu). Ponadto, student powinien posiadać praktyczne umiejętności obsługi oprogramowania do modelowania molekularnego, nabyte podczas studiów pierwszego stopnia.

### Cel przedmiotu

Przyswojenie przez studentów wiedzy teoretycznej oraz praktycznej w zakresie modelowania molekularnego makrocząsteczek biologicznych. Szczegółowe cele to zaznajomienie studentów z metodami konstrukcji oraz modyfikacji złożonych biocząsteczek, jak również możliwościom prognozowania ich właściwości metodami in silico.

### Przedmiotowe efekty uczenia się

Wiedza:

K\_W03 absolwent zna i rozumie w pogłębionym stopniu zagadnienia z zakresu wybranych nauk ścisłych przydatne do modelowania procesów biologicznych P7U\_W

K\_W04 absolwent zna i rozumie metody, techniki i narzędzia wykorzystywane w procesie rozwiązywania złożonych zadań bioinformatycznych, głównie o charakterze inżynierskim P7U\_W

K\_W09 absolwent zna i rozumie szczegółowe zagadnienia z zakresu modelowania i analizy systemów biologicznych oparte na solidnych podstawach teoretycznych P7U\_W

Umiejętności:

K\_U01 absolwent potrafi biegle wykorzystywać i integrować informacje pozyskane z literatury i źródeł elektronicznych, w języku polskim i angielskim, dokonywać ich interpretacji i krytycznej oceny P7U\_U

K\_U02 absolwent potrafi wyciągać wnioski, jasno formułować i wyczerpująco uzasadniać swoje opinie na podstawie danych pochodzących z różnych źródeł P7U\_U

K\_U06 absolwent potrafi pod kierunkiem opiekuna naukowego planować i wykonać zadania badawcze z wykorzystaniem metod analitycznych, symulacyjnych oraz eksperymentalnych P7U\_U

Kompetencje społeczne:

K\_K01 absolwent jest gotów do uczenia się przez całe życie, inspirowania i organizowania procesu uczenia się innych osób P7U\_K

K\_K03 absolwent jest gotów do określania priorytetów służących realizacji zadania zdefiniowanego przez siebie lub innych P7U\_K

K\_K08 absolwent jest gotów do systematycznego aktualizowania swojej wiedzy z zakresu biologii i informatyki oraz dostrzegania możliwości jej praktycznego zastosowania P7U\_K

## Metody weryfikacji efektów uczenia się i kryteria oceny

Efekty uczenia się przedstawione wyżej weryfikowane są w następujący sposób:

Wykład:

Po zakończeniu cyklu wykładów wiedza studentów zostanie zweryfikowana w ramach zaliczenia pisemnego z 5 otwartymi pytaniami dotyczącymi zagadnień teoretycznych i praktycznych. Warunkiem zaliczenia jest uzyskanie ilości punktów większej niż 50% przyjętego maksimum.

Laboratoria:

W trakcie cyklu zajęć laboratoryjnych wiedza studentów zostanie zweryfikowana poprzez realizację zadań programowych. Na końcu cyklu zajęć laboratoryjnych zostanie przeprowadzone kolokwium praktyczne ze znajomości metod modelowania molekularnego, obejmującego trzy zadania. Warunkiem zaliczenia jest poprawne rozwiązanie zadań programowych oraz uzyskanie z kolokwium ilości punktów większej niż 50% przyjętego maksimum.

## Treści programowe

W ramach przedmiotu omówione zostaną następujące zagadnienia teoretyczne: struktury białeczek (rzędowość, stabilizacja wiązaniami), tworzenie struktur biopolimerowych (struktury monomerów, wpływ na konformację biologicznych oligo- i polimerów), wspomagana komputerowo analiza widm w podczerwieni (analiza i interpretacja modelu i rzeczywistych wyników), praktyczne zastosowanie funkcji periodic box (symulacja zachowania związków w środowisku rozpuszczalnika)

Ponadto, zrealizowane zostaną zajęcia dotyczące wiedzy praktycznej w zakresie podstawowych zasad modelowania molekularnego - analiza kluczowych parametrów geometrycznych w zaawansowanych strukturach biomolekuł, różnice wynikające z poziomu modelowania molekularnego w kontekście makrostruktur i układów wielcząścielkowych, symulacje komputerowe i eksperymentalne dane w kontekście analizy strukturalnej, oddziaływanie makrobiocząstek z wybranymi związkami o istotnej roli biologicznej.

## Metody dydaktyczne

Wykład obejmujący multimedialną prezentację omawianych treści oraz angażowanie studentów w dyskusje naukowe.

Laboratoria obejmujące praktyczne umiejętności w zakresie obsługi oprogramowania i rozwiązywania problemów dotyczących modelowania molekularnego.

## Literatura

Podstawowa

1. J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers, Chemia organiczna, tom I, II i III, WNT, Warszawa 2009.
2. J. Gawroński, K. Gawrońska, K. Kacprzak, M. Kwit, Współczesna synteza organiczna, PWN, Warszawa

Uzupełniająca

1. J. Skarżewski - Wprowadzenie do syntezy organicznej, PWN, Warszawa 1999

2. M.B. Smith, J. March, Advanced Organic Chemistry, Reaction, Mechanism and Structure, J.Wiley & Sons, New Jersey 2007

3. A.I. Vogel, Preparatyka organiczna, WNT, Warszawa 2006

### Bilans nakładu pracy przeciętnego studenta

	Godzin	ECTS
Łączny nakład pracy	50	2,00
Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem	30	1,50
Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych/ćwiczeń, przygotowanie do kolokwίων/egzaminu, wykonanie projektu)	20	0,50