



KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Modelowanie molekularne biocząsteczek [S2Bioinf2>MMB]

Przedmiot

Kierunek studiów
Bioinformatyka

Rok/Semestr
1/2

Studia w zakresie (specjalność)
–

Profil studiów
ogólnoakademicki

Poziom studiów
drugiego stopnia

Język oferowanego przedmiotu
polski

Forma studiów
stacjonarne

Wymagalność
obligatoryjny

Liczba godzin

Wykład
30

Laboratorium
30

Inne
0

Ćwiczenia
0

Projekty/seminaria
0

Liczba punktów ECTS

5,00

Koordynatorzy

dr hab. inż. Mariusz Sandomierski
mariusz.sandomierski@put.poznan.pl

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:

- zna i rozumie w pogłębionym stopniu zagadnienia z zakresu metod matematyki, statystyki, optymalizacji i sztucznej inteligencji przydatne do modelowania i analizy procesów biologicznych
- zna i rozumie metody, techniki i narzędzia wykorzystywane w procesie rozwiązywania złożonych zadań bioinformatycznych, głównie o charakterze inżynierskim
- zna i rozumie szczegółowe zagadnienia z zakresu modelowania i analizy systemów biologicznych oparte na solidnych podstawach teoretycznych
- zna i rozumie szczegółowe zagadnienia z zakresu bioinformatyki strukturalnej oparte na solidnych podstawach teoretycznych

Umiejętności:

- potrafi biegle wykorzystywać i integrować informacje pozyskane z literatury i źródeł elektronicznych, w języku polskim i angielskim, dokonywać ich oceny, krytycznej analizy, syntezy oraz twórczej interpretacji
- potrafi wyciągać wnioski, jasno formułować i wyczerpująco uzasadniać swoje opinie na podstawie danych pochodzących z różnych źródeł
- potrafi stosować wiedzę z zakresu biochemii i nauk pokrewnych do rozwiązywania problemów bioinformatycznych
- potrafi pod kierunkiem opiekuna naukowego planować i wykonać zadania badawcze, w tym o charakterze inżynierskim, z wykorzystaniem metod analitycznych, symulacyjnych oraz eksperymentalnych
- potrafi stosować metody matematyczne (w tym statystyczne) oraz specjalistyczne techniki i narzędzia informatyczne do opisu procesów i analizy danych biologicznych

Kompetencje społeczne:

- jest gotów do określania priorytetów służących realizacji zadania zdefiniowanego przez siebie lub innych i podejmowania działań zmierzających do realizacji zadań w sposób przedsiębiorczy
- jest gotów do określania priorytetów służących realizacji zadania zdefiniowanego przez siebie lub innych i podejmowania działań zmierzających do realizacji zadań w sposób przedsiębiorczy

Metody weryfikacji efektów uczenia się i kryteria oceny

Efekty uczenia się przedstawione wyżej weryfikowane są w następujący sposób:

Ocena kształtująca:

Wykład

Każdy kolejny wykład będzie rozpoczynał się od zwięzłego podsumowania zagadnień omawianych w ramach poprzedniego tematu wraz z krótką dyskusją dotyczącą zrozumienia i umiejętności zastosowania wiedzy w praktyce. Pozwoli to ocenić czy studenci przyswoili materiał.

Laboratoria

W trakcie cyklu zajęć laboratoryjnych wiedza studentów zostanie zweryfikowana poprzez realizację zadań programowych. Każdorazowo będą powtarzane elementy, które pojawiły się na poprzednich zajęciach, co pozwoli przeanalizować stopień ich opanowania przez studentów.

Ocena podsumowująca:

Wykład

Po zakończeniu cyklu wykładów wiedza studentów zostanie zweryfikowana w ramach egzaminu pisemnego z 10 otwartymi pytaniami dotyczącymi zagadnień teoretycznych i praktycznych. Warunkiem zaliczenia jest uzyskanie ilości punktów większej niż 50% przyjętego maksimum.

Laboratoria

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 ilości punktów większej niż 50% przyjętego maksimum.

Treści programowe

W ramach przedmiotu zostaną omówione zagadnienia dotyczące zasad modelowania molekularnego białczasteczek.

Tematyka zajęć

W ramach przedmiotu omówione zostaną następujące zagadnienia teoretyczne: struktury białczasteczek (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). W dalszej części wykładu przybliżone zostaną podstawowe zagadnienia z zakresu chemii supramolekularnej, makrostruktur, biopolimerów oraz wspomagana komputerowo interpretacja analiz strukturalnych. Ponadto, zrealizowane zostaną zajęcia dotyczące wiedzy praktycznej w zakresie zasad modelowania molekularnego - analiza kluczowych parametrów geometrycznych w zaawansowanych strukturach biomolekuł, różnice wynikające z poziomu modelowania molekularnego w kontekście makrostruktur i układów wielocząsteczkowych, wykorzystanie symulacji komputerowych i eksperymentalnych danych do analizy strukturalnej, oddziaływanie makrobiocząstek z wybranymi związkami o istotnej roli biologicznej, potencjalne problemy występujące w układach wielocząsteczkowych, korzystanie z baz danych do szybkiego konstruowania struktur biomolekuł.

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	125	5,00
Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem	60	2,50
Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych/ćwiczeń, przygotowanie do kolokwium/egzaminu, wykonanie projektu)	65	2,50