

**SYLABUS**

DOTYCZY CYKLU KSZTAŁCENIA 2022/2023-2023/2024

(skrajne daty)

Rok akademicki 2022/2023

**1. PODSTAWOWE INFORMACJE O PRZEDMIOCIE**

Nazwa przedmiotu	<b>Modelowanie biomolekularne</b>
Kod przedmiotu*	
Nazwa jednostki prowadzącej kierunek	Kolegium Nauk Przyrodniczych
Nazwa jednostki realizującej przedmiot	Kolegium Nauk Przyrodniczych, Instytut Biologii i Biotechnologii
Kierunek studiów	Biotechnologia
Poziom studiów	II stopień
Profil	ogólnoakademicki
Forma studiów	stacjonarne
Rok i semestr/y studiów	rok I, semestr 1
Rodzaj przedmiotu	kierunkowy
Język wykładowy	język polski
Koordinator	
Imię i nazwisko osoby prowadzącej / osób prowadzących	dr inż. Katarzyna Rydel-Ciszek

\* -opcjonalnie, zgodnie z ustaleniami w Jednostce

**1.1. Formy zajęć dydaktycznych, wymiar godzin i punktów ECTS**

Semestr (nr)	Wykt.	Ćw.	Konw.	Lab.	Sem.	ZP	Prakt.	Inne (jakie?)	Liczba pkt. ECTS
1				15					2

**1.2. Sposób realizacji zajęć**

- zajęcia w formie tradycyjnej
- zajęcia realizowane z wykorzystaniem metod i technik kształcenia na odległość

**1.3 Forma zaliczenia przedmiotu (z toku) (egzamin, zaliczenie z oceną, zaliczenie bez oceny)**

ZALICZENIE Z OCENĄ

**2. WYMAGANIA WSTĘPNE**

UKOŃCZONE KURSY: CHEMII, FIZYKI, BIOFIZYKI I BIOCHEMII

### 3. CELE, EFEKTY UCZENIA SIĘ, TREŚCI PROGRAMOWE I STOSOWANE METODY DYDAKTYCZNE

#### 3.1 Cele przedmiotu

C1	Opanowanie podstaw pozyskiwania wiedzy o biolakromolekułach z wykorzystaniem (i) metod eksperymentalnych, (ii) bioinformatycznych baz danych, (iii) symulacji komputerowych.
C2	Opanowanie podstawowych umiejętności z zakresu modelowania molekularnego ze szczególnym uwzględnieniem modeli białek i kwasów nukleinowych oraz oddziaływujących z nimi związków małowcząsteczkowych.
C3	Zapoznanie się z metodologią przygotowania symulacji komputerowych z zakresu modelowania molekularnego.
C4	Zdobycie umiejętności interpretacji wyników modelowania i dokowania molekularnego.
C5	Praktyczne wykorzystanie zdobytych umiejętności do rozwiązywania prostych problemów z obszaru biologii molekularnej metodami obliczeniowymi.

#### 3.2 Efekty uczenia się dla przedmiotu

EK (efekt uczenia się)	Treść efektu uczenia się zdefiniowanego dla przedmiotu	Odniesienie do efektów kierunkowych <sup>1</sup>
EK_01	Student posiada wiedzę na temat budowy strukturalnej biolakromolekuł, źródeł eksperymentalnych danych strukturalnych, metodyki przeszukiwania dedykowanych bioinformatycznych baz danych oraz metodyki symulacji komputerowych.	K_W01 K_W02 K_K04
EK_02	Student ma wiedzę na temat oddziaływań molekularnych i ich wpływu na aktywność biologiczną.	K_W01 K_W02 K_U02
EK_03	Student rozumie proces modelowania molekularnego i potrafi wykorzystać te umiejętności do przeprowadzenia wielowariantowych symulacji zarówno indywidualnie jak i w grupie.	K_W06 K_U02 K_K03
EK_04	Student ma świadomość ciągłego rozwoju technik symulacji komputerowych a tym samym konieczność podnoszenia swoich kwalifikacji w tym obszarze.	K_K04 K_K03

#### 3.3 Treści programowe

##### A. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych

Treści merytoryczne
Omówienie źródeł eksperymentalnych strukturalnych informacji biologicznych oraz ich wpływu na jakość danych wykorzystywanych w symulacjach. Struktura bioinformatycznych baz danych

<sup>1</sup> W przypadku ścieżki kształcenia prowadzącej do uzyskania kwalifikacji nauczycielskich uwzględnić również efekty uczenia się ze standardów kształcenia przygotowującego do wykonywania zawodu nauczyciela.

zawierających informacje strukturalne wraz z metodyką ich przeszukiwania oraz interpretacją wyników wyszukiwania.
Główne koncepcje modelowania molekularnego wraz z omówieniem podstaw molekularnych oddziaływań receptor-ligand. Elementy analizy strukturalnej oraz technik wizualizacji uzyskanych wyników. Techniki komputerowe wykorzystywane w modelowaniu struktur biomakromolekuł z uwzględnieniem centrów aktywnych.
Symulacja oddziaływań receptor-ligand na wybranych przykładach.

### 3.4 Metody dydaktyczne

Ćwiczenia laboratoryjne:

- praca indywidualna oraz w grupach nad zadanym projektem,
- dyskusja i interpretacja uzyskanych wyników cząstkowych symulacji,
- przygotowanymi rysunków i wizualizacji uzyskanych wyników,
- przygotowanie raportu końcowego z uzyskanych wyników.

## 4. METODY I KRYTERIA OCENY

### 4.1 Sposoby weryfikacji efektów uczenia się

Symbol efektu	Metody oceny efektów uczenia się (np.: kolokwium, egzamin ustny, egzamin pisemny, projekt, sprawozdanie, obserwacja w trakcie zajęć)	Forma zajęć dydaktycznych (w, ćw, lab.)
EK_01	obserwacja w trakcie zajęć, projekt	Ćw
EK_02	obserwacja w trakcie zajęć, dyskusja na uzyskanymi wynikami symulacji, projekt	Ćw
EK_03	obserwacja w trakcie zajęć, dyskusja na uzyskanymi wynikami symulacji, projekt	Ćw
EK_04	obserwacja w trakcie zajęć, dyskusja na uzyskanymi wynikami symulacji, projekt	Ćw

### 4.2 Warunki zaliczenia przedmiotu (kryteria oceniania)

Na końcową ocenę z zaliczenia ćwiczeń ma wpływ: zaliczenie poszczególnych ćwiczeń i wykonanie ćwiczenia - projektu zaliczeniowego.

## 5. CAŁKOWITY NAKŁAD PRACY STUDENTA POTRZEBNY DO OSIĄGNIĘCIA ZAŁOŻONYCH EFEKTÓW W GODZINACH ORAZ PUNKTACH ECTS

Forma aktywności	Średnia liczba godzin na zrealizowanie aktywności
Godziny kontaktowe wynikające z harmonogramu studiów	15
Inne z udziałem nauczyciela akademickiego (udział w konsultacjach, egzaminie)	5
Godziny niekontaktowe – praca własna	35

studenta (przygotowanie do zajęć, egzaminu, napisanie referatu itp.)	
SUMA GODZIN	55
<b>SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS</b>	<b>2</b>

\* Należy uwzględnić, że 1 pkt ECTS odpowiada 25-30 godzin całkowitego nakładu pracy studenta.

## 6. PRAKTYKI ZAWODOWE W RAMACH PRZEDMIOTU

wymiar godzinowy	-
zasady i formy odbywania praktyk	-

## 7. LITERATURA

Literatura podstawowa:

1. Materiały szkoleniowe i instrukcje obsługi programów: PyMOL, ArgusLab, AutoDock, AutoDock Vina, Jalview, Avogadro.
2. Materiały szkoleniowe i instrukcje obsługi bioinformatycznych baz danych: UniProt, RCSB PDB i PDBe, Genbank.
3. Materiały szkoleniowe i instrukcje obsługi wybranych narzędzi bioinformatycznych: SwissModel, Expasy.

Literatura uzupełniająca:

1. Instant Notes: Bioinformatics, Westhead *et al.*,
2. Textbook of Structural Biology, Liljas *et al.*,

Akceptacja Kierownika Jednostki lub osoby upoważnionej