

**SYLABUS**DOTYCZY CYKLU KSZTAŁCENIA 2019/2020-2020/2021  
(skrajne daty)

Rok akademicki 2019/2020

**1. PODSTAWOWE INFORMACJE O PRZEDMIOCIE**

Nazwa przedmiotu	<b>Modelowanie biomolekularne</b>
Kod przedmiotu*	B/II/K.8
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	dr hab. Dariusz Pogocki, prof. UR
Imię i nazwisko osoby prowadzącej / osób prowadzących	dr hab. Dariusz Pogocki, prof. UR

\* -opcjonalnie, zgodnie z ustaleniami w Jednostce

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

Semestr (nr)	Wykł.	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

C <sub>1</sub>	Praktyczne opanowanie podstawowych umiejętności z zakresu modelowania molekularnego ze szczególnym uwzględnieniem modeli białek i kwasów nukleinowych. Wykorzystanie programów do sporządzania modeli prostych cząsteczek organicznych i złożonych struktur makrocząsteczek.
C <sub>2</sub>	Praktyczne opanowanie podstawowych zagadnień z dziedziny mechaniki molekularnej (pola siłowe), minimalizacji energii, symulacji dynamiki molekularnej i Monte Carlo. Zdobyć umiejętność interpretacji wyników modelowania molekularnego. podstaw pozyskiwania wiedzy o strukturze białek i kwasów nukleinowych zarówno metodami eksperymentalnymi jak i komputerowymi.
C <sub>3</sub>	Zapoznanie się z metodologią parametryzacji małych cząsteczek organicznych na potrzeby wybranych pól siłowych.
C <sub>3</sub>	Wykorzystuje zdobyte umiejętności do rozwiązywania prostych problemów z obszaru biologii molekularnej metodami modelowania molekularnego.

#### 3.2 Efekty uczenia się dla przedmiotu

EK (efekt uczenia się)	Treść efektu uczenia się zdefiniowanego dla przedmiotu Student:	Odniesienie do efektów kierunkowych <sup>1</sup>
EK_01	Definiuje podstawowe pojęcia modelowania molekularnego interpretując informacje strukturalne dotyczące biocząsteczek zdeponowane w bazach danych i wskazuje eksperymentalne źródła pochodzenia informacji strukturalnej zdeponowanej w zbiorach bazy, zna ograniczenia wynikające z charakteru tych źródeł.	K_Wo1, K_Wo2, K_Ko2
EK_02	Zna podstawowe metody modelowania stosowane przy rozwiązywaniu prostych zadań z zakresu biochemii i biotechnologii.	K_Wo1, K_Wo2, K_Ko2
EK_03	Potrafi przygotować zadania obliczeniowe mechaniki i dynamiki molekularnej i uruchomić je na komputerze lokalnym, oraz na maszynie zdalnej działającej w systemie Linux	K_Wo2, K_Wo6, K_Uo1, K_Ko3
EK_04	Potrafi przeprowadzić proces parametryzacji prostej cząsteczki organicznej. A uzyskane parametry wprowadzić do lokalnej bazy pola siłowego CHARMM.	K_Wo2, K_Wo6, K_Uo1, K_Uo2, K_Ko3, K_Ko4
EK_05	Umie jakościowo zinterpretować wyniki modelowania molekularnego i odnieść je do wielkości uzyskanych eksperymentalnie.	K_Uo1, K_Uo2, K_Ko4, K_Ko7
EK_06	Potrafi współpracować w grupie.	K_Uo8, K_Ko7

<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.

### 3.3 Treści programowe

- A. Problematyka ćwiczeń audytoryjnych, konwersatoryjnych, laboratoryjnych, zajęć praktycznych

Treści merytoryczne
Definicja i perspektywy modelowania molekularnego. Eksperymentalne źródła informacji strukturalnej dotyczącej biocząsteczek, zdeponowanej w bazach danych. Podstawowe sposoby zapisu informacji strukturalnej.
Podstawy Mechaniki Molekularnej. Struktura przestrzenna cząsteczki i oddziaływania międzyatomowe. Funkcja potencjału i jej parametry. Optymalna struktura układu molekularnego. Metody minimalizacji funkcji potencjału
Podstawy Dynamiki Molekularnej i metod Stochastycznych. Założenie ergodyczności dynamiki. Rozwiązania równania ruchu dla atomów w układzie. Warunki symulacji dynamiki (zespoły statystyczne), dynamika Langevina. Modele solwatacji.

### 3.4 Metody dydaktyczne

Ćwiczenia laboratoryjne - praca w grupach, dyskusja nad przygotowanymi rysunkami technicznymi.

## 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, ...)
EK_01-EK_05	obserwacja w trakcie zajęć, 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)	2
Godziny niekontaktowe – praca własna studenta (przygotowanie do zajęć, egzaminu, napisanie referatu itp.)	33

SUMA GODZIN	50
<b>SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS</b>	2

*\* 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: Avogadro, VMD, NAMD, ChemCraft, Argus-lab, putty i WinSCP.

Literatura uzupełniająca:

1. Molecular Modelling: Principles and Applications. A. R. Leach, Longman, 1996

2. [http://www.molnet.eu/index.php?option=com\\_content&view=article&id=158:badanie-struktury-przestrzennej-hemoglobiny1-poslugiwanie-sie-baza-pdb&catid=11&Itemid=105](http://www.molnet.eu/index.php?option=com_content&view=article&id=158:badanie-struktury-przestrzennej-hemoglobiny1-poslugiwanie-sie-baza-pdb&catid=11&Itemid=105)

Akceptacja Kierownika Jednostki lub osoby upoważnionej