

SYLABUS
DOTYCZY CYKLU KSZTAŁCENIA 2020-2022
(skrajne daty)
 Rok akademicki 2020/2021

1. PODSTAWOWE INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

Nazwa przedmiotu	Modelowanie biomolekularne
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	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)	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

C ₁	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 ₂	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 ₃	Zapoznanie się z metodologią parametryzacji małych cząsteczek organicznych na potrzeby wybranych pól siłowych.
C ₃	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	Odniesienie do efektów kierunkowych ¹
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_Wo1, K_Uo2, K_Ko4
EK_06	Potrafi współpracować w grupie.	K_Uo8

¹ 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_06	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
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS	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

Akceptacja Kierownika Jednostki lub osoby upoważnionej