

**SYLABUS PRZEDMIOTU – SZKOŁA DOKTORSKA
CYKL KSZTAŁCENIA OD 2025/2026 DO 2028/2029**

OGÓLNE INFORMACJE O PRZEDMIOCIE	
Tytuł przedmiotu	METODYKA BADAŃ NAUKOWYCH
Nazwa jednostki realizującej przedmiot	Szkoła Doktorska Uniwersytetu Rzeszowskiego
Typ przedmiotu (<i>obowiązkowy, fakultatywny</i>)	obowiązkowy
Rok/semestr	I rok/ I i II semestr
Dyscyplina	biotechnologia
Język wykładowy	język angielski
Imię i nazwisko koordynatora przedmiotu	Prof. dr hab. Maciej Wnuk
Imię i nazwisko prowadzącego przedmiot	Prof. dr hab. Maciej Wnuk
Wymagania wstępne	<p>Uczestnik zajęć powinien posiadać kompetencje odpowiadające 7. poziomowi Polskiej Ramy Kwalifikacji, potwierdzające gotowość do prowadzenia zaawansowanych prac naukowych w dyscyplinie biotechnologia. W zakresie wiedzy wymagane jest posiadanie pogłębionego zrozumienia metodologii badań naukowych, w tym znajomości procedur laboratoryjnych, kinetyki enzymatycznej oraz teoretycznych podstaw biologii molekularnej i biochemii makromolekuł. Kandydat musi wykazywać się umiejętnością samodzielnego planowania i realizacji eksperymentów zgodnie z zasadami Dobrej Praktyki Laboratoryjnej (GLP) oraz bezpieczeństwa higieny pracy. Wymagane jest ponadto zaawansowane przygotowanie w zakresie krytycznej analizy literatury przedmiotu, sprawnego posługiwania się specjalistycznymi bazami danych oraz biegłość w obsłudze aparatury i oprogramowania wspierającego procesy badawcze. W obszarze kompetencji społecznych kandydat musi cechować się wysokim etosem pracy naukowej, przejawiającym się w rzetelności, odpowiedzialności za prowadzony proces badawczy oraz świadomym przestrzeganiu zasad ochrony własności intelektualnej i upowszechniania wyników badań. Istotną umiejętnością jest również autonomia w rozwiązywaniu złożonych problemów badawczych, przy jednoczesnej gotowości do efektywnej współpracy w interdyscyplinarnym środowisku naukowym, w tym do aktywnego uczestnictwa w krajowych i międzynarodowych sieciach wymiany wiedzy.</p>
STRESZCZENIE PRZEDMIOTU	
(syntetyczny opis treści oraz celów przedmiotu; 100-200 słów)	
<p>Przedmiot koncentruje się na zastosowaniu zaawansowanych metod <i>in silico</i> w analizie strukturalnej i funkcjonalnej metylotransferaz RNA typu m⁵C, ze szczególnym uwzględnieniem izoform NSUN1–7 oraz TRDMT1. Program łączy teoretyczne podstawy biologii molekularnej z praktycznym wykorzystaniem narzędzi bioinformatycznych w procesie <i>Structure-Based Drug Discovery</i> (SBDD). Uczestnicy poznają etapy projektowania badań: od modelowania homologicznego i analizy krystalograficznej, przez identyfikację kieszeni aktywnych enzymów, aż po wirtualny screening celowanych bibliotek leków przeciwwirusowych.</p> <p>Celem przedmiotu jest wyposażenie badacza w umiejętności niezbędne do samodzielnego prowadzenia projektów z zakresu inżynierii molekularnej. Kluczowym elementem jest analiza stabilności kompleksów białko-ligand przy użyciu dynamiki molekularnej (MD) oraz optymalizacja farmakoforowa, co pozwala na rozwiązywanie problemów selektywności izoform.</p>	

EFEKTY UCZENIA SIĘ DLA PRZEDMIOTU I METODY WERYFIKACJI

Symbol efektu uczenia się	Zakładane efekty uczenia się	Odniesienie do efektów uczenia się dla kwalifikacji na poziomie 8 PRK (symbol)	Forma zajęć dydaktycznych (w., ćw., itp.)	Metody weryfikacji (np.: kolokwium, egzamin ustny, egzamin pisemny, projekt itp.)
Wiedza: Lp.	<i>zna i rozumie, posiada wiedzę</i>			przykład:
P8S_WG3	Posiada pogłębioną wiedzę na temat mechanizmów działania epitranskryptomu jako celu terapeutycznego, ze szczególnym uwzględnieniem biologii molekularnej metylotransferaz RNA. Zna teoretyczne podstawy projektowania leków wspomaganego strukturą (SBDD – Structure-Based Drug Discovery) oraz rozumie ograniczenia klasycznych metod modulacji receptorów i kinaz.	P8S_WG	konwersatorium	przygotowanie publikacji, dyskusja
P8S_WG4	Posiada wiedzę z zakresu metodologii obliczeniowej (<i>in silico</i>): Rozumie teoretyczne podstawy modelowania homologicznego oraz zaawansowanych symulacji dynamiki molekularnej (MD) . Zna parametry fizykochemiczne determinujące plastyczność centrów aktywnych białek oraz zasady interpretacji wyników symulacji w kontekście interakcji białko-ligand	P8S_WG	konwersatorium	opracowania pisemne, dyskusja
P8S_WK3	Posiada wiedzę w zakresie wykorzystania strategii repositioningu leków poprzez wirtualny screening celowanych bibliotek chemicznych, co umożliwia skuteczne przeniesienie wyników badań podstawowych do fazy rozwiązań terapeutycznych, skracając proces rozwoju innowacyjnych leków.	P8S_WK	konwersatorium	opracowania pisemne, dyskusja
Umiejętności: Lp.	<i>potrafi</i>			
P8S_UW1	Potrafi integrować zaawansowane metody obliczeniowe (<i>in silico</i>) w procesie badawczym, w tym tworzenie modeli homologicznych oraz prowadzenie zaawansowanych symulacji dynamiki molekularnej (MD) w celu analizy plastyczności centrów aktywnych białek. Umiejętnie stosuje strategię repositioningu leków poprzez wirtualny screening celowanych bibliotek chemicznych, co pozwala na optymalizację ścieżki translacyjnej badań podstawowych w stronę rozwiązań terapeutycznych. Potrafi analizować	P8S_UW	konwersatorium	opracowania pisemne, dyskusja

	oddziaływania mechanistyczne między inhibitorem a substratem SAM, prowadząc do skutecznej optymalizacji farmakoforowej.					
P8S_UK1	Potrafi skutecznie konferować i prezentować wyniki badań nad epitranskryptomycznym ekosystemem oraz innowacyjnymi metodami <i>in silico</i> , dostosowując przekaz do odbiorców ze środowisk naukowych i branży farmaceutycznej. Dzieli się efektami swoich prac, włączając się w dyskusję nad nowymi kierunkami w biotechnologii medycznej.			P8S_UK	konwersatorium	opracowania pisemne, prezentowanie wyników badań
P8S_UO1	Aktywnie potrafi integrować wyniki zaawansowanych symulacji dynamiki molekularnej (MD) oraz analiz mechanistycznych z potrzebami gospodarczymi, promując tym samym rozwój nowoczesnej inżynierii molekularnej jako narzędzia o wysokiej wartości aplikacyjnej w globalnym obiegu naukowym.			P8S_UO	konwersatorium	opracowania pisemne
Kompetencje społeczne: Lp.	jest gotów do					
P8S_KR1	Jest gotów do prowadzenia działalności naukowej w sposób niezależny i rzetelny, dbając o najwyższe standardy etyki w badaniach molekularnych. Prowadzi prace nad epitranskryptomem i inhibitorami enzymatycznymi z poszanowaniem zasad uczciwości naukowej, co buduje wiarygodność wyników w środowisku krajowym i międzynarodowym.			P8S_KR	konwersatorium	dyskusja
FORMY ZAJĘĆ DYDAKTYCZNYCH, WYMIAR GODZIN I PUNKTÓW₁						
Semestr (nr)	Wykł.	Ćwiczenia	Lab.	Prakt.	Inne	Liczba pkt. ECTS
I	-	-	-	-	30	3
II	-	-	-	-	30	3
razem:	-	-	-	-	60	6
METODY DYDAKTYCZNE						
- konwersatorium w formie tradycyjnej; - konwersatorium z prezentacją multimedialną; - projekt; - dyskusja.						
TREŚCI PROGRAMOWE						
semestr I:						
Moduł 1: Modelowanie i analiza strukturalna (Fundamenty)						
<ul style="list-style-type: none"> • Wprowadzenie do epitranskryptomiki: Rola metylotransferaz m⁵C w regulacji ekspresji genów. • Zaawansowane modelowanie białek: Tworzenie i walidacja modeli 3D dla izoform NSUN1–7 (homologia, modelowanie <i>ab initio</i>). 						

- Analiza struktur krystalograficznych: Praca z bazą PDB w kontekście TRDMT₁; techniki weryfikacji jakości struktur krystalograficznych (mapy gęstości elektronowej, ocena parametrów geometrycznych).

Moduł 2: Charakterystyka centrów aktywnych i kieszeni substratowych

- Identyfikacja kieszeni wiążących: Wykorzystanie algorytmów geometrycznych i energetycznych do mapowania kieszeni aktywnych metylotransferaz.
- Analiza właściwości fizykochemicznych: Ocena hydrofobowości, potencjału elektrostatycznego i dostępności rozpuszczalnikowej kieszeni (wykorzystanie serwerów typu CASTp czy FPocket).
- Zrozumienie interakcji z substratem: Mechanizmy rozpoznawania RNA oraz wiązania kofaktora SAM wewnątrz enzymu.

semestr II:

Moduł 3: Virtual Screening i projektowanie leków (Translacja)

- Wirtualny screening celowany: Metodologia przygotowania bibliotek związków (leki przeciwwirusowe/istniejące bazy) i przygotowania ligandów do dokowania.
- Molekularne dokowanie (Docking): Implementacja algorytmów dokowania w celu identyfikacji "hitów".
- Walidacja za pomocą dynamiki molekularnej (MD): Analiza stabilności kompleksu białko-ligand, fluktuacji konformacyjnych oraz energetyka wiązania (metody typu MM/GBSA).
- Projektowanie farmakoforowe: Definiowanie kluczowych cech (akceptory/donory wiązań wodorowych, grupy hydrofobowe) niezbędnych do selektywnej inhibicji NSUN/TRDMT₁.

WARUNKI ZALICZENIA PRZEDMIOTU (KRYTERIA OCENIANIA)

Przedmiot realizowany jest w semestrach od I do II, przedmiot po semestrze I kończy się zaliczeniem z oceną ZO₁, po semestrze II realizacji zajęć kończy się egzaminem E₂. Zajęcia z przedmiotu realizowane są w bezpośrednim kontakcie doktorantki/doktoranta z promotorem lub promotorem pomocniczym.

Warunkiem uzyskania zaliczenia przedmiotu po semestrze I, jest przedstawienie sprawozdania w formie prowadzonego konspektu badań z realizacji zadania. Warunkiem pozytywnego zdania egzaminu z przedmiotu po semestrze II, jest zdobycie co najmniej 51% punktów z pracy ustnej.

Aby uzyskać ocenę pozytywną stosuje się przelicznik za odpowiedni procent uzyskanych punktów:

- do 50% - niedostateczny, (doktorant nie robi postępów w badaniach naukowych, nie poszerza wiedzy, nie studiuje lektur, nie uczestniczy w merytorycznej dyskusji, nie wywiązuje się z obowiązków naukowych);

- 51% - 60% - dostateczny, (doktorant robi znikome postępy w badaniach naukowych, poszerza wiedzę, studiuje literaturę podstawową, prowadzona dyskusja ogranicza się do wąskiego zakresu wiedzy merytorycznej, wywiązuje się z podstawowych obowiązków naukowych);

- 61% - 70% - dostateczny plus, (doktorant robi postępy w badaniach naukowych, poszerza wiedzę, studiuje literaturę podstawową, merytorycznie uczestniczy w dyskusji, wywiązuje się z obowiązków naukowych);

- 71% - 80% - dobry, (doktorant robi znaczące postępy w badaniach naukowych, poszerza wiedzę, studiuje literaturę podstawową i uzupełniającą, merytorycznie uczestniczy w dyskusji, wywiązuje się z wszystkich obowiązków naukowych);

- 81% - 90% - dobry plus, (doktorant robi znaczące postępy w badaniach naukowych, systematycznie poszerza wiedzę, studiuje literaturę podstawową i uzupełniającą, merytorycznie uczestniczy w dyskusji, wywiązuje się z wszystkich obowiązków naukowych);

- 91% - 100% - bardzo dobry (doktorant robi znaczące postępy w badaniach naukowych, systematycznie poszerza wiedzę, studiuje literaturę podstawową, uzupełniającą i wykraczającą poza obowiązującą, merytorycznie uczestniczy w dyskusji, wywiązuje się z wszystkich obowiązków naukowych);

CAŁKOWITY NAKŁAD PRACY DOKTORANTA POTRZEBNY DO OSIĄGNIĘCIA ZAŁOŻONYCH EFEKTÓW W GODZINACH ORAZ PUNKTACH ECTS

Forma aktywności	Średnia liczba godzin na zrealizowanie aktywności
Godziny realizowane w kontakcie bezpośrednim wynikające planu z studiów	2 x 30 godz. – 60 godz.

Inne z udziałem nauczyciela (udział w konsultacjach, egzaminie)	10
Godziny realizowane samodzielnie przez doktoranta (przygotowanie do zajęć, egzaminu, napisanie referatu itp.)	110 godz.
SUMA GODZIN	180
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS*	6

LITERATURA

Literatura podstawowa:	<ul style="list-style-type: none"> • Jain, S. et al. (2020). Structure-Based Drug Discovery: An Overview. W: "Methods in Molecular Biology". • Schlick, T. (2010). Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide. Springer. • Leach, A. R. (2001). Molecular Modelling: Principles and Applications. Pearson.
Literatura uzupełniająca:	<ul style="list-style-type: none"> • Sliwoski, G., Kothiwale, S., Meiler, J., & Lowe, E. W. (2014). <i>Computational Methods in Drug Discovery</i>. "Pharmacological Reviews". • Jumper, J. et al. (2021). <i>Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold</i>. "Nature". • Wang, J. et al. (2019). <i>Drug repositioning: a promising and powerful strategy for rare disease treatment</i>. "Expert Opinion on Orphan Drugs".:

* (1 PUNKT ECTS ODPOWIADA OD 25 – 30 GODZIN CAŁKOWITEGO NAKŁADU PRACY DOKTORANTA, POTRZEBNEGO DO OSIĄGNIĘCIA ZAŁOŻONYCH EFEKTÓW)

.....
Data i podpis prowadzącego przedmiotu

.....
Akceptacja Kierownika Jednostki lub osoby upoważnionej