



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY



Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Modelowanie struktury biocząstek		11.3.2160	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Teoretycznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki	Bioinformatyka	forma	stacjonarne
		moduł	Podstawowa
		specjalnościowy	Podstawowa
		specjalizacja	Podstawowa
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Cezary Czaplowski, profesor uczelni; Piotr Ciura; dr Rafał Ślusarz; dr Magdalena Ślusarz			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		5	
Wykład, Ćw. laboratoryjne			
Sposób realizacji zajęć			
zajęcia w sali dydaktycznej			
Liczba godzin			
Ćw. laboratoryjne: 60 godz., Wykład: 15 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2025/2026 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
<ul style="list-style-type: none"> - Wykład z prezentacją multimedialną - wykonywanie ćwiczeń w pracowni komputerowej •praca własna - przygotowanie projektu zaliczeniowego •praca własna - przygotowanie sprawozdań 		Sposób zaliczenia	
		Egzamin	
		Formy zaliczenia	
		<ul style="list-style-type: none"> - egzamin pisemny testowy - ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru 	
		Podstawowe kryteria oceny	

Wykład:

- Egzamin pisemny składający się z testu **wielokrotnego wyboru**
- Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny z zaliczenia pisemnego jest zdobycie minimum 51% punktów możliwych do uzyskania. Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim regulaminem studiów.
- Studenci, którzy uzyskali w pierwszym terminie zaliczenia pisemnego wynik 51% i więcej, a chcą podwyższyć ocenę, mogą zgłosić się na egzamin ustny. Ocena końcowa jest w tym przypadku średnią arytmetyczną z ocen uzyskanych na zaliczeniu pisemnym i ustnym.
- Zaliczenie ustne jest obowiązkowe dla studentów, którzy uzyskali z egzaminu pisemnego wynik pomiędzy 41% a 50%. W tym przypadku student otrzymuje szansę uzupełnienia punktów brakujących do uzyskania oceny dostatecznej (omawia sposób poprawnego rozwiązania zadań z zaliczenia pisemnego). W tym przypadku nie ma możliwości poprawienia oceny z pierwszego terminu zaliczenia na wyższą.
- Negatywna ocena z egzaminu (pisemnego i ustnego) musi być poprawiona podczas egzaminu poprawkowego odbywającego się w oparciu o te same zasady co egzamin w pierwszym terminie.
- Ocena może być podwyższona o połowę studentom szczególnie aktywnie uczestniczącym w dyskusji naukowej podczas zajęć.

Ćwiczenia laboratoryjne:

- Samodzielne wykonanie wszystkich zadanych ćwiczeń w pracowni komputerowej. Nieobecność można odrobić podczas zajęć z inną grupą ćwiczeniową lub w trakcie konsultacji u prowadzącego.
- Potwierdzenie umiejętności prezentacji uzyskanych wyników oraz ich naukowej dyskusji poprzez uzyskanie pozytywnej oceny ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia.
- Zaliczenie wszystkich kolokwium wejściowych obejmujących podstawowe zagadnienia teoretyczne niezbędne do poprawnego wykonania ćwiczenia. Niezaliczone kolokwia należy poprawić w dodatkowym terminie wyznaczonym przez prowadzącego na zakończenie semestru (poza zajęciami).
- Ocena końcowa z ćwiczeń jest średnią ważoną ze średnich arytmetycznych ocen otrzymanych z (i) kolokwium pisemnych (waga 40%), oraz (ii) sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia (waga 60%).
- Ocena może być podwyższona o połowę studentom szczególnie aktywnie uczestniczącym w dyskusji naukowej podczas zajęć.
- Niezaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych skutkuje niedopuszczeniem do zaliczenia wykładu do chwili uzyskania zaliczenia.

Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

Poziom przyswojenia wiedzy przez studenta jest weryfikowany na egzaminie zaliczającym przedmiot (K_W04).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Nabycie przez studenta umiejętności jest weryfikowane w czasie egzaminu zaliczającego przedmiot, w ocenie projektu zaliczeniowego oraz pisemnych sprawozdaniach z realizacji ćwiczeń a także poprzez obserwację aktywności na zajęciach (K_U02, K_U03).

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi**A. Wymagania formalne**

- Python z podstawami algorytmiki
- Metody numeryczne dla bioinformatyków
- Metody matematyczne bioinformatyki

B. Wymagania wstępne

- Umiejętność pracy w systemie Unix
- Umiejętność programowania w języku Python

Cele kształcenia

Praktyczne zapoznanie studentów z technikami i narzędziami chemii obliczeniowej wykorzystywanymi w modelowaniu molekularnym białek ze szczególnym uwzględnieniem modelowania białek i dokowania molekularnego

Treści programowe

Wizualizacja struktury i dynamiki białek oraz innych makrocząsteczek (z wykorzystaniem programów Pymol, Chimera, Vmd). Symulacje dynamiki molekularnej w modelu pełnoatomowym (programy z pakietów Amber i Gromacs) i gruboziarnistym (modele UNRES, Martini). Dokowanie molekularne (program AutoDock Vina). Parametryzacja empirycznych pól siłowych dla ligandów i aminokwasów niebiałkowych z wykorzystaniem metod chemii kwantowej (antechamber z pakietu Amber, obliczenia kwantowochemiczne w programach Gamess i Gaussian). Przewidywanie struktury białek i ich kompleksów, przedstawienie CASP i CAPRI (wykorzystanie programów i portali internetowych takich jak Modeller, I-TASSER, UNRES-server, ClusPro, UNRES-Dock, CABS-dock). Wykorzystanie samodzielnie napisanych programów w języku Python do opracowania i wizualizacji wyników obliczeń i symulacji.

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

A.1. wykorzystywana podczas zajęć

- <https://ambermd.org/>
- <http://manual.gromacs.org/documentation/>
- <https://predictioncenter.org/index.cgi>
- <https://www.capri-docking.org/>
- <https://salilab.org/modeller/>
- Rozdział 13. Komputery w chemii medycznej z Chemia medyczna. Podstawowe zagadnienia, Graham Baker, Graham L. Patrick, WNT 2003

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta

- dostępne w Internecie materiały o wykorzystywanych w czasie zajęć programach i portalach internetowych

B. Literatura uzupełniająca

- Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, Heermann Dieter W., WNT 1997
- Idee chemii kwantowej, Lucjan Piel, PWN 2005
- Molecular Modelling: Principles and Applications, Andrew Leach, Prentice Hall 2001

Kierunkowe efekty uczenia się

KW_04 Ma wiedzę w zakresie podstawowych technik i narzędzi badawczych stosowanych w bioinformatyce
 KU_02 Potrafi zastosować wiedzę z nauk przyrodniczych i ścisłych do formułowania, analizowania i rozwiązywania problemów związanych z bioinformatyką
 KU_03 Stosuje podstawowe metody matematyczne i statystyczne do opisu zjawisk i analizy danych; posiada umiejętność podstawowej analizy danych w profesjonalnych bazach danych wykorzystywanych w bioinformatyce

Wiedza

Student nazywa i opisuje podstawowe metody modelowania molekularnego. Rozróżnia metody chemii kwantowej od metod mechaniki molekularnej oraz deterministyczne i stochastyczne metody symulacji komputerowych. Charakteryzuje przybliżenia wykorzystane w empirycznych polach siłowych. Rozróżnia modele pełnoatomowe od gruboziarnistych, zna ich wady i zalety. Zna podstawy dokowania molekularnego. Zna metody przewidywania struktur białek i ich kompleksów. Opisuje na czym polegają eksperymenty oceniające skuteczność teoretycznych metod przewidywania struktur białek (Critical Assessment of protein Structure Prediction = CASP) i ich kompleksów (Critical Assessment of PRediction of Interactions = CAPRI).

Umiejętności

Student wybiera odpowiednią metodę modelowania molekularnego do wspomżenia pracy eksperymentalnej. Potrafi zastosować różne metody wizualizacji struktury i dynamiki białek oraz innych makrocząsteczek. Prowadzi symulacje komputerowe w wybranych programach służących do modelowania struktury i dynamiki białek, analizuje wyniki symulacji komputerowych z wykorzystaniem samodzielnie napisanych programów w języku Python, porównuje wyniki obliczeń z danymi eksperymentalnymi. Stosuje dokowanie molekularne do modelowania kompleksów białek z ligandami. Parametryzuje empiryczne pole siłowe z wykorzystaniem obliczeń kwantowochemicznych. Przewiduje struktury białek i ich kompleksów z wykorzystaniem wybranych programów i portali internetowych. Potrafi wykorzystać wyniki eksperymentów CASP i CAPRI oceniających skuteczność teoretycznych metod przewidywania struktur białek i ich kompleksów do wyboru stosowanych metod obliczeniowych.

Kompetencje społeczne (postawy)

Student poznaje zasady bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy na komputerach podłączonych do sieci. Wykazuje odpowiedzialność za konto osobiste w wielodostępnym systemie komputerowym oraz za bezpieczeństwo jego zasobów. Pracuje samodzielnie oraz w grupie.

Kontakt

cezary.czaplewski@ug.edu.pl