

(pieczęć wydziału)

**KARTA PRZEDMIOTU**

<b>1. Nazwa przedmiotu: METODY KOMPUTEROWE W BIOLOGII MOLEKULARNEJ</b>		<b>2. Kod przedmiotu:</b>		
<b>3. Karta przedmiotu ważna od roku akademickiego: 2012/2013</b>				
<b>4. Forma kształcenia:</b> studia pierwszego stopnia				
<b>5. Forma studiów:</b> studia stacjonarne				
<b>6. Kierunek studiów:</b> BIOTECHNOLOGIA; WYDZIAŁ AEII				
<b>7. Profil studiów:</b> ogólnoakademicki				
<b>8. Specjalność:</b> BIOINFORMATYKA				
<b>9. Semestr:</b> 6				
<b>10. Jednostka prowadząca przedmiot:</b> Instytut Automatyki, RAU1				
<b>11. Prowadzący przedmiot</b> dr inż. Marcin PACHOLCZYK				
<b>12. Przynależność do grupy przedmiotów:</b> przedmioty specjalnościowe				
<b>13. Status przedmiotu:</b> wybieralny				
<b>14. Język prowadzenia zajęć:</b> polski				
<b>15. Przedmioty wprowadzające oraz wymagania wstępne:</b> Matematyka, Biologia Molekularna i Genetyka Ogólna, Informatyka, Bioinformatyka, Fizyka i Biofizyka. Zakłada się znajomość podstawowych pojęć z zakresu algebry liniowej, zagadnień fizyki klasycznej (mechanika, termodynamika, elektrostatyka), wiadomości dotyczących molekularnych podstaw życia (białka, kwasy nukleinowe i ich funkcje w organizmach żywych), podstaw programowania komputerów, umiejętność korzystania z narzędzi i baz danych bioinformatycznych dostępnych w sieci Internet.				
<b>16. Cel przedmiotu:</b> Celem wykładu jest przekazanie studentom podstawowych wiadomości z zakresu modelowania molekularnego ze szczególnym uwzględnieniem modeli białek i kwasów nukleinowych, zagadnień z dziedziny mechaniki molekularnej (pola siłowe), minimalizacji energii systemu molekularnego, symulacji dynamiki molekularnej i Monte Carlo, podstaw pozyskiwania wiedzy o strukturze białek i kwasów nukleinowych zarówno metodami eksperymentalnymi jak i komputerowymi. Zakres wykładu obejmuje również wiadomości związane z komputerowym wspomaganie projektowania leków (CADD), metody konstruowania drzew filogenetycznych oraz zagadnienia ewolucji molekularnej i genetyki populacyjnej.				
<b>17. Efekty kształcenia:</b>				
Nr	Opis efektu kształcenia	Metoda sprawdzenia efektu kształcenia	Forma prowadzenia zajęć	Odniesienie do efektów dla kierunku studiów
1	Zna podstawowe pojęcia z zakresu modelowania molekularnego ze szczególnym uwzględnieniem białek i kwasów nukleinowych	SP, CL	WM	K_W08 K_W07 K_W22
2	Ma wiedzę z dziedziny podstaw mechaniki molekularnej i symulacji dynamiki molekularnej i Monte Carlo.	SP, CL	WM	K_W08 K_W22
3	Zna podstawowe źródła i metody pozyskiwania informacji o strukturach przestrzennych białek	SP, CL	WM	K_W20 K_W25
4	Posiada podstawowe wiadomości z zakresu komputerowo wspomaganego projektowania leków	SP, CL	WM	K_W21
5	Zna podstawowe metody konstrukcji drzew filogenetycznych i posiada wiedzę na temat podstawowych modeli ewolucji molekularnej	SP, CL	WM	K_W22
6	Potrafi zbudować homologiczny model struktury białka i ocenić jego jakość.	PS, CL	L	K_U06 K_U08 K_U27

7	Potrafi korzystać z narzędzi i baz danych bioinformatycznych dostępnych w sieci Internet.	PS, CL	L	K_U01 K_U18
8	Potrafi wyznaczać odległości ewolucyjne pomiędzy sekwencjami i na tej podstawie konstruować drzewa filogenetyczne.	PS, CL	L	K_U11 K_U26
9	Potrafi samodzielnie podejmować decyzje dotyczące wyboru najlepszych narzędzi i modeli molekularnych	CL, PS	L	K_K03
10	Potrafi zaprezentować i obronić zaproponowany model lub wynik symulacji komputerowej	OS	L	K_K07
<b>18. Formy zajęć dydaktycznych i ich wymiar (liczba godzin)</b>				
<b>W.:30 L.:15</b>				
<b>19. Treści kształcenia:</b>				
<b>Wykład</b>				
1. Użyteczne koncepcje w modelowaniu molekularnym. Opis systemów molekularnych . Powierzchnie molekularne. Jednostki miar w modelowaniu molekularnym. Podstawowe koncepcje matematyczne. Użyteczne oprogramowanie.				
2. Empiryczne pola sił – mechanika molekularna				
3. Metody minimalizacji energii systemu molekularnego				
4. Symulacje komputerowe				
5. Dynamika molekularna				
6. Symulacje Monte Carlo				
7. Analiza konformacyjna				
8. Podstawy krystalografii rentgenowskiej				
9. Modelowanie i przewidywanie struktury przestrzennej białek				
10. Cheminformatyka i projektowanie leków				
11. Filogenetyka molekularna				
12. Genetyka populacyjna				
<b>Zajęcia laboratoryjne</b>				
1. Modelowanie struktury przestrzennej białek. Źródła informacji o strukturach przestrzennych białek i kwasów nukleinowych. Podstawowe narzędzia stosowane w modelowaniu homologicznym (Modeller, Swiss-Model). Budowa modeli homologicznych białek o wysokim podobieństwie do wzorca. Narzędzia wizualizacji i analizy struktur molekularnych (Chimera, DeepView).				
2. Identyfikacja i analiza miejsc wiążących. Definicja i własności miejsca wiążącego. Oddziaływania białko-ligand (wiązania wodorowe, oddziaływania hydrofobowe i jonowe). Zagadnienia ewolucji miejsc wiążących.				
3. Metody wyznaczania drzew filogenetycznych, wyznaczanie odległości ewolucyjnych, dopasowanie wielosekwencyjne, narzędzia konstrukcji oraz wizualizacji drzew filogenetycznych.				
4. Analiza widm rezonansu magnetycznego. Poprawa jakości sygnału, w szczególności filtracja, korekta fazy i modelowanie sygnału.				
<b>20. Egzamin:</b> nie				

<b>21. Literatura podstawowa:</b>				
1. A. Leach Molecular Modeling – principles and applications. Prentice Hall 2001				
2. A. Hinchliffe Molecular Modelling for Beginners. Wiley 2003				
3. H-D. Holtje Molecular Modeling: Basic principles and Applications. Wiley-VCH 2008				
4. J. Polański, A. Bąk Podstawy cheminformatyki leków. Uniwersytet Śląski 2010				
5. Paul G. Higgs, Teresa K. Attwood. Bioinformatyka i ewolucja molekularna, PWN, 2008				
22. Literatura uzupełniająca:				
6. G. Patrick Chemia medyczna. WNT 2003				
7. R. Silverman Chemia organiczna w projektowaniu leków. WNT 2003				
8. D. Frenkel, B. Smit Understanding molecular simulation. Academic Press 2002				
9. K. Pigoń, Z. Ruziewicz Chemia fizyczna t. 2. Fizykochemia molekularna. PWN 2007				
10. Jin Xiong. Podstawy Bioinformatyki. Wydawnictwa Uniwersytetu Warszawskiego, 2009				
11. A.D. Baxevanisa, B.F.F. Ouellette'a. Bioinformatyka podręcznik do analizy genów i białek. PWN, 2004				

**23. Nakład pracy studenta potrzebny do osiągnięcia efektów kształcenia**

Lp.	Forma zajęć	Liczba godzin kontaktowych / pracy studenta
1	Wykład	30/15
2	Ćwiczenia	0/0
3	Laboratorium	15/15
4	Projekt	0/0
5	Seminarium	0/0
6	Inne	0/15
	Suma godzin	45/45

**24. Suma wszystkich godzin:90****25. Liczba punktów ECTS: 3****26. Liczba punktów ECTS uzyskanych na zajęciach z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego: 2****27. Liczba punktów ECTS uzyskanych na zajęciach o charakterze praktycznym (laboratoria, projekty):1****26. Uwagi:**

Zatwierdzono:

.....  
(data i podpis prowadzącego).....  
(data i podpis dyrektora instytutu/kierownika katedry/  
Dyrektora Kolegium Języków Obcych/kierownika lub  
dyrektora jednostki międzywydziałowej)