

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: Metody komputerowe w biologii molekularnej (BioAu>SI6MKBM19)

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim:

Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Automatyki, Elektroniki i Informatyki

Przedmiot dla jednostki: Politechnika Śląska

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

ZAL

Język wykładowy:

polski

Strona WWW:

<https://platforma.polsl.pl/rau1/course/view.php?id=350>

Skrócony opis:

Celem przedmiotu 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.

Opis:

Wykład:

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, dynamika molekularna, symulacje Monte Carlo
5. Modelowanie i przewidywanie struktury przestrzennej białek, podstawy krystalografii rentgenowskiej
6. Cheminformatyka i projektowanie leków
7. Filogenetyka molekularna
8. Genetyka populacyjna

Laboratorium:

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, PyMol).
2. Dokowanie molekularne. Definicja i własności miejsca wiążącego. Identyfikacja i analiza miejsc wiążących. Oddziaływania białko-ligand (wiązania wodorowe, oddziaływania hydrofobowe i jonowe).
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.

Literatura:

Literatura podstawowa:

1. Leach Molecular Modeling – principles and applications. Prentice Hall 2001
2. 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

Literatura uzupełniająca:

1. G. Patrick Chemia medyczna. WNT 2003
2. R. Silverman Chemia organiczna w projektowaniu leków. WNT 2003
3. D. Frenkel, B. Smit Understanding molecular simulation. Academic Press 2002
4. K. Pigoń, Z. Ruziewicz Chemia fizyczna t. 2. Fizykochemia molekularna. PWN 2007
5. Jin Xiong. Podstawy Bioinformatyki. Wydawnictwa Uniwersytetu Warszawskiego, 2009
6. A.D. Baxevanisa, B.F.F. Ouellette'a. Bioinformatyka podręcznik do analizy genów i białek. PWN, 2004

Efekty uczenia się:

Wiedza - student zna i rozumie

- (1) Podstawowe pojęcia z zakresu modelowania molekularnego ze szczególnym uwzględnieniem białek i kwasów nukleinowych
- (2) Podstawy mechaniki molekularnej i symulacji dynamiki molekularnej i Monte Carlo
- (3) Podstawowe źródła i metody pozyskiwania informacji o strukturach przestrzennych białek
- (4) Podstawowe wiadomości z zakresu komputerowo wspomaganego projektowania leków
- (5) Podstawowe metody konstrukcji drzew filogenetycznych i posiada wiedzę na temat podstawowych modeli ewolucji molekularnej

Umiejętności - student potrafi

- (6) Zbudować homologiczny model struktury białka i ocenić jego jakość

- (7) Korzystać z narzędzi i baz danych bioinformatycznych dostępnych w sieci Internet
 (8) Samodzielnie podejmować decyzje dotyczące wyboru najlepszych narzędzi i modeli molekularnych
 (9) Zaprezentować i obronić zaproponowany model lub wynik symulacji komputerowej

Metody i kryteria oceniania:

Wykład

Zaliczenie pisemne w formie testu zawierającego pytania otwarte lub wielokrotnego wyboru

Laboratorium

Zaliczenie pisemne w formie sprawozdań z ćwiczeń laboratoryjnych

Przynależność do grup przedmiotów w cyklach:

Opis grupy przedmiotów	Cykl pocz.	Cykl kon.
Biotechnologia S1 semestr 6 specj. BIO (BioAu>SI6-BIO-19)	2021/2022-L	

Punkty przedmiotu w cyklach:

<bez przypisanego programu>

Typ punktów	Liczba	Cykl pocz.	Cykl kon.
Europejski System Transferu Punktów (ECTS)	3	2021/2022-L	