

(pieczęć wydziału)

KARTA PRZEDMIOTU

--	--	--

1. Nazwa przedmiotu: Metody komputerowe w biologii molekularnej		2. Kod przedmiotu: MKwBM		
3. Karta przedmiotu ważna od roku akademickiego: 2017/2018				
4. Forma kształcenia: studia doktoranckie				
5. Forma studiów: studia stacjonarne/niestacjonarne				
6. Kierunek studiów: BIOCYBERNETYKA I INŻYNIERIA BIOMEDYCZNA				
7. Profil studiów: akademicki				
8. Specjalność:				
9. Semestr:				
10. Jednostka prowadząca przedmiot: Instytut Automatyki, RAU I				
11. Prowadzący przedmiot: dr inż. Marcin Pacholczyk				
12. Przynależność do grupy przedmiotów: przedmioty fakultatywne				
13. Status przedmiotu:				
14. Język prowadzenia zajęć: polski/angielski				
15. Przedmioty wprowadzające oraz wymagania wstępne: 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.				
16. Cel przedmiotu: 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.				
17. Efekty kształcenia:				
Nr	Opis efektu kształcenia	Metoda sprawdzenia efektu kształcenia	Forma prowadzenia zajęć	Odniesienie do efektów dla kierunku studiów
W1	Ma wiedzę z dziedziny podstaw mechaniki molekularnej i symulacji dynamiki molekularnej i Monte Carlo.		WM	RAU_B_W05
W2	Zna podstawowe pojęcia z zakresu modelowania molekularnego ze szczególnym uwzględnieniem białek i kwasów nukleinowych		WM	RAU_B_W03 RAU_B_W04
W3	Zna podstawowe źródła i metody pozyskiwania informacji o strukturach przestrzennych białek		WM	RAU_B_W02 RAU_B_W06
U1	Potrafi korzystać z narzędzi i baz danych bioinformatycznych dostępnych w sieci Internet.		WM	RAU_B_U01
U2	Potrafi zbudować homologiczny model struktury białka i ocenić jego jakość.		WM	RAU_B_U11 RAU_B_U13

				RAU_B_U14
K1	Potrafi zaprezentować i obronić zaproponowany model lub wynik symulacji komputerowej		WM	RAU_B_K02
18. Formy zajęć dydaktycznych i ich wymiar (liczba godzin) W. : 10				
19. Treści kształcenia: 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 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				
20. Egzamin: nie Zaliczenie na podstawie dyskusji w trakcie wykładów oraz opcjonalnie na podstawie przedłożonego przez studenta opracowania pisemnego wybranego zagadnienia.				
21. Literatura podstawowa: 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 chemoinformatyki leków. Uniwersytet Śląski 2010				
22. Literatura uzupełniająca: 1. G. Patrick Chemia medyczna. WNT 2003 2. 6. R. Silverman Chemia organiczna w projektowaniu leków. WNT 2003				
23. Nakład pracy studenta potrzebny do osiągnięcia efektów kształcenia				
Lp.	Forma zajęć	Liczba godzin kontaktowych / pracy studenta		
1	Wykład	10/5		
2	Ćwiczenia	0/0		
3	Laboratorium	0/0		
4	Projekt	0/0		
5	Seminarium	0/0		
6	Inne konsultacje	5/5		
	Suma godzin	15/10		
24. Suma wszystkich godzin: 25				
25. Liczba punktów ECTS: 1				
26. Liczba punktów ECTS uzyskanych na zajęciach z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego: 1				
27. Liczba punktów ECTS uzyskanych na zajęciach o charakterze praktycznym (laboratoria, projekty): 0				

26. Uwagi:

Efekty kształcenia w zakresie wiedzy weryfikowane są na bieżąco w trakcie wykładów, natomiast umiejętności podlegają weryfikacji poprzez formułowanie i rozwiązywanie zadań praktycznych. Efekty kształcenia w zakresie kompetencji społecznych sprawdzane są w trakcie pracy zespołowej nad przykładowymi problemami badawczymi oraz przy opracowywaniu i prezentacji raportów końcowych.

Zatwierdzono:

.....
(data i podpis kierownika studiów doktoranckich)