

Nazwa przedmiotu: Modelowanie molekularne i obliczeniowa biologia strukturalna cz. II (1100-3BP23)

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: Molecular modelling and computational structural biology 2

Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Fizyki

Przedmiot dla jednostki: Wydział Fizyki

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Egzamin

Język wykładowy:

polski

Skrócony opis:

Od przybliżenia Borna-Oppenheimera do mechanicznego modelu układów (bio)molekularnych. Wyznaczanie stabilnych stanów struktury - lokalne i globalne metody minimalizacji energii. Ruchy molekularne - mikroskopowa dynamika molekularna i mezoskopowa dynamika brownowska. Metody Monte-Carlo oraz symulacje energii swobodnej. Fizyka i procesy ewolucji molekularnej. Mechanizmy tworzenia się uporządkowanych biomolekularnych struktur. Mechanizmy rozpoznawania się układów biomolekularnych. Biomolekularne maszyny i układy złożone.

Opis:

Od przybliżenia Borna-Oppenheimera do mechanicznego modelu układów (bio)molekularnych - przypomnienie. Mikroskopowe i mezoskopowe potencjały oddziaływania. Oddziaływania hydrodynamiczne. Wyznaczanie stabilnych stanów struktury - lokalne i globalne metody minimalizacji energii. Metody najszybszego spadku i Newtona-Raphsona, operatory wygładzania hiperpowierzchni energii. Przykłady stabilnych struktur kwasów nukleinowych i białek. Struktury A, B i Z DNA. Foldy białek. Metody porównywania struktur białek i kwasów nukleinowych. Homologia sekwencji i struktur. Ruchy molekularne - mikroskopowa klasyczna i kwantowa dynamika molekularna oraz mezoskopowa dynamika brownowska. Opis algorytmów i metody badania ich stabilności. Metody Monte-Carlo oraz symulacje energii swobodnej. Termodynamiczny rachunek zaburzeń. Alchemia komputerowa. Fizyka i procesy ewolucji molekularnej. Mechanizmy tworzenia się uporządkowanych biomolekularnych struktur. Mechanizmy rozpoznawania się układów biomolekularnych. Biomolekularne maszyny i układy złożone. Od stałych szybkości reakcji biochemicznych do systemów sygnałowych i regulacyjnych. Przykłady onkogennych mutacji i ich wpływ na systemy regulacji.

Literatura:

1. D.W.Heermann, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa, 1997.
2. Robert Kosiński, Wprowadzenie do mechaniki kwantowej i fizyki statystycznej, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2006.
3. L.Piela, Idee chemii kwantowej, PWN, Warszawa, lub inny podręcznik molekularnej mechaniki kwantowej.
4. P.O.J. Dcherer, S.F. Fischer, Theoretical Molecular Biophysics, Springer, Heidelberg, 2010 (ISBN 978-3-540-85609-2)
5. A.R.Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications (2nd Edition), Prentice Hall; ISBN: 0582382106, 2001.
6. Materiały robocze do wykładów, <http://kms.bioexploratorium.pl/>

Efekty kształcenia:

Nauczenie studentów modelowania matematycznego i komputerowego układów biomolekularnych oraz symulacji wybranych procesów z wykorzystaniem metod mechaniki i dynamiki molekularnej, metod Monte-Carlo oraz podstaw teorii systemów. Wykład i ćwiczenia przygotowują słuchaczy do samodzielnego modelowania układów biomolekularnych, oraz projektowania inhibitorów enzymów – potencjalnych leków.

Metody i kryteria oceniania:

Zaliczenie dwóch ćwiczeń na pracowni komputerowej oraz zdanie pisemnego testu.

Praktyki zawodowe:

Praktyki możliwe do odbycia w Instytucie Medycyny Doświadczalnej i Klinicznej PAN w Warszawie.

Założenia (opisowo)

Wymagana podstawowa wiedza dotycząca metod molekularnego modelowania i obliczeniowej biologii strukturalnej. Umiejętność pracy w przynajmniej jednym środowisku modelowania układów (bio)molekularnych, takich jak NAMD/VMD, MOE lub Schrodinger.

Przynależność do grup przedmiotów w cyklach:

Opis grupy przedmiotów	Cykl pocz.	Cykl kon.
ZFBM - Projektowanie molekul i bioinformatyka; przedmioty dla III roku (1100-BProMol_3)	2010	

Punkty przedmiotu w cyklach:

<bez przypisanego programu>			
Typ punktów	Liczba	Cykl pocz.	Cykl kon.
Europejski System Transferu i Akumulacji Punktów (ECTS)	6	2010	2013
Europejski System Transferu i Akumulacji Punktów (ECTS)	8	2014	