

<b>Nazwa przedmiotu</b> <b>Komputerowa analiza struktur DNA i białek</b>		<b>Kod ECTS</b> 6.5-KAS												
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b> WYDZIAŁ CHEMII Uniwersytetu Opolskiego														
<b>Studia</b> <table border="1"> <tr> <td><b>kierunek</b></td> <td><b>stopień</b></td> <td><b>tryb</b></td> <td><b>specjalność</b></td> <td><b>specjalizacja</b></td> </tr> <tr> <td>Biologia</td> <td>I (licencjat)</td> <td>stacjonarne</td> <td>Biologia eksperymentalna</td> <td></td> </tr> </table>					<b>kierunek</b>	<b>stopień</b>	<b>tryb</b>	<b>specjalność</b>	<b>specjalizacja</b>	Biologia	I (licencjat)	stacjonarne	Biologia eksperymentalna	
<b>kierunek</b>	<b>stopień</b>	<b>tryb</b>	<b>specjalność</b>	<b>specjalizacja</b>										
Biologia	I (licencjat)	stacjonarne	Biologia eksperymentalna											
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b> Dr hab. Teobald Kupka, prof. UO														
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>												
<b>A. Formy zajęć</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>wykład,</li> <li>konwersatorium</li> </ul>		<b>Godziny kontaktowe</b> - udział w wykładach: 15 x 1h = 15h - udział w laboratoriach: 15 x 1h = 15h - konsultacje 1h Razem 31h = 1p. ECTS												
<b>B. Sposób realizacji</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>zajęcia w sali dydaktycznej</li> </ul>		<b>Praca własna studenta</b> - przygotowanie do laboratoriów 15h - przygotowanie do egzaminu na ocenę 15h Razem 30h = 1 p. ECTS W (1p. ECTS) + L (1 p. ECST)												
<b>C. Liczba godzin</b> 15W, 15L														
<b>Status przedmiotu</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>do wyboru</li> </ul>		<b>Język wykładowy</b> polski												
<b>Metody dydaktyczne</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>wykład z prezentacją multimedialną</li> <li>konwersatorium w oparciu o prezentacje przygotowane przez studentów</li> </ul>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymaganie egzaminacyjne</b>												
		<b>Sposób zaliczenia</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>wykład: obecność, zaliczenie na ocenę</li> <li>laboratorium: zaliczenie z oceną</li> </ul>												
		<b>B. Formy zaliczenia</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>laboratorium: ustalenie oceny zaliczeniowej w oparciu o oceny częściowe otrzymywane w trakcie semestru na podstawie aktywnego uczestnictwa w dyskusji</li> </ul>												
		<b>C. Podstawowe kryteria</b> wykład: do zdania egzaminu konieczne jest uczestniczenie w wykładach laboratorium: ocenę zaliczeniową ustala się na podstawie ocen częściowych												
<b>Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi</b>														
A. <u>Wymagania formalne</u> : brak B. <u>Wymagania wstępne</u> : podstawowa znajomość struktur DNA i białek.														

**Cele przedmiotu**

Zrozumienie sposobu modelowania zjawisk zachodzących w układach biologicznych.

**Treści programowe**

**A. Problematyka wykładu:** Zagadnienia z zakresu modelowania podstawowych struktur w próżni. Oddziaływania ze środowiskiem (efekt rozpuszczalnika i (de)protonowanie). Metody mechaniki molekularnej i dynamiki molekularnej oraz pół empiryczne, ab initio i DFT. Wykorzystanie spektroskopii, techniki rentgenowskiej i rozpraszania neutronów do badań nad budową i funkcjonowaniem DNA i białek. Budowa DNA i białek. Podstawowe cegiełki DNA (zasady azotowe, cukry, reszta fosforanowa). Podstawowy budulec białek (aminokwasy). Modelowanie podstawowych elementów budowy DNA i białek (przewidywanie budowy przestrzennej, oddziaływań typu wiązanie wodorowe, wpływ rozpuszczalnika, jonów, parametrów spektralnych, w tym IR, Raman i NMR). Modelowanie budowy i działania centrum aktywnego enzymów. Porównywanie wyników teoretycznych z dostępnymi eksperymentalnymi (w tym struktura w bazach danych PDB uzyskana z badań rentgenowskich i NMR).

**B. Problematyka laboratorium:** praktyczne modelowanie układów biologicznych za pomocą pakietu programów komputerowych.

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

1. I. N. Levine „Quantum chemistry”. Prentice Hall, Upper Saddle River, 2000.
2. L. Piel „Idee chemii kwantowej”, PWN, Warszawa, 2001.
3. L. Stryer „Biochemia”, wyd. IV, PWN, Warszawa, 1997.

**B. Literatura uzupełniająca**

1. F. Jensen, „Introduction to computational chemistry”, Wiley, New York, 2007.

**Wiedza**

K\_W06 Zna podstawy spektroskopii IR, Ramana oraz NMR – w szczególności ich zastosowanie do identyfikacji struktur biologicznych OP1A\_W06

**Umiejętności**

K\_U04 Potrafi wykorzystywać poznane metody chemii kwantowej do obliczeń dla układów biologicznych OP1A\_U04

K\_U05 Umie identyfikować proste struktury na podstawie analizy widm uzyskanych za pomocą poznanych spektroskopii OP1A\_U05

**Kompetencje społeczne (postawy)**

K\_K02 Wykazuje aktywną postawę w dążeniu do poznawania metod oraz programów do modelowania struktur OP1A\_K02

K\_K03 Jest zdolny do rozwiązywania podstawowych problemów z zakresu identyfikacji struktur OP1A\_K03

**Kontakt**

Dr hab. Teobald Kupka, teobaldk@gmail.com