

# Tytuły wykładu:

„Modelowanie molekularne II”  
BT289

Prof. dr hab. Marta Pasenkiewicz-Gierula  
Zakład Biofizyki Obliczeniowej i Bioinformatyki WBBiB UJ  
Pokój: A021, parter  
Tel: 664-6518  
E-mail: [marta.pasenkiewicz-gierula@uj.edu.pl](mailto:marta.pasenkiewicz-gierula@uj.edu.pl)

**„Modelowanie molekularne II”**  
**BT289; Biofizyka IV rok, 2012/2013**

Materiały do kursu (wykłady 2011/12) znajdują się na stronie:

<http://bioinfo.mol.uj.edu.pl/courses> (Teaching)

**(BT289 Molecular Modelling 2)**

pdf w wersji czarno-białej (wersja do wydruku) i kolorowej (kolor)

Teraz tylko „Kolor”

**„Modelowanie molekularne II”  
BT289; Biofizyka IV rok, 2012/2013**

**Kurs: 15 godz. wykład, 30 godz. ćwiczeń, 30 godz. seminarium**

**Wykład : Środa 10:15-11:45 (Sala P0.3 ZDB)**

**Ćwiczenia : Piątek 8:00-12:30 (5×6 godz.) (S. D112)**

**Seminarium : Wtorek 16:00-18:15 (10×3 godz.) (S. Z. Biof. B018)**

10 października wykład nie odbędzie się (konferencja)

Wykład 90 min bez przerwy

# „Modelowania molekularne II ” Biofizyka IV rok, 2012/2013

Wykład: Środa 10:15-11:45

## Zagadnienia omawiane na wykładzie

(siedem 2-godzinnych wykładów od 17. X do 28. XI 2012, bez 10 października):

1. Podsumowanie metod modelowania molekularnego
2. Kontrola temperatury i ciśnienia w układzie symulacyjnym
3. Analiza wyników symulacji dynamiki molekularnej – zasada ergodyczności
  - a. parametry strukturalne
  - b. parametry dynamiczne
  - c. błędzenie przypadkowe a ruch dyfuzyjny
4. Sprawdzanie wiarygodności modeli komputerowych

# „Modelowanie molekularne II” Biofizyka IV rok, 2012/2013

## Ćwiczenia

Ćwiczenia: **Piątek 8:00-12:30**; od 19. X (bez 2. XI) (5×6 godz.) (sala D112)

### Tytuły ćwiczeń:

**ĆWICZENIE 1.** Białkowa baza danych strukturalnych Protein Data Bank, elementy strukturalne makrocząsteczek, wstępne porównanie dwóch struktur.

**ĆWICZENIE 2.** Porównywanie fizykochemicznych własności i struktur biocząsteczek. Optymalizacja struktury biocząsteczki. Porównanie metod minimalizacyjnych.

**ĆWICZENIE 3.** Modelowanie mutacji peptydu i białka metodą zaburzenia energii swobodnej oraz bezpośredniej wymiany aminokwasu.

**ĆWICZENIE 4.** Wyznaczanie natywnej struktury biocząsteczki poprzez poszukiwanie minimum globalnego funkcji potencjału.

**„Modelowanie molekularne II” Biofizyka IV rok, 2012/2013**  
**Ćwiczenia**

Ćwiczenia (5×6 godz.) **Piątek 8:00-12:30** od 19. X (bez 2. XI) (sala D112)

**Tytuły ćwiczeń:**

**ĆWICZENIE 5.** Własności elektrostatyczne cząsteczek – Równanie Poissona-Boltzmannna.

## **„Modelowanie molekularne II” Biofizyka IV rok, 2012/2013**

### **Co student musi umieć, czyli minimum na pozytywną ocenę**

Student potrafi zbudować wiarygodny model komputerowy układu cząsteczkowego, m. in. korzystając z bazy danych strukturalnych PDB oraz przeprowadzić wizualizację tego układu.

Potrafi zadać określone warunki termodynamiczne układu i uruchomić jego symulację dynamiki molekularnej.

Wie, co to jest trajektoria układu i odróżnia średniowanie po zespole od średniowania po czasie.

Wie, na czym polega sprawdzenie wiarygodności modelu komputerowego.

Potrafi wyznaczyć podobieństwo dwóch struktur.

Rozumie różnicę między lokalnym i globalnym minimum funkcji potencjału i wie, jakim strukturom cząsteczki odpowiadają oba minima.

**SPRAWDZIĆ USOS – EFEKTY KSZTAŁCENIA!!**



# **„Modelowanie molekularne II” Biofizyka IV rok, 2012/2013**

## **Ćwiczenia**

Ćwiczenia (5×6 godz.) **Piątek 8:00-12:30**, od 19. X (bez 2. XI)

**Materiały do ćwiczeń są na stronie:**

<http://bioinfo.mol.uj.edu.pl/courses> (Teaching)

Login : **modmol**

Hasło : **torsj4**

Ćwiczenia prowadzi: dr Michał Markiewicz

**email:** [m.markiewicz@uj.edu.pl](mailto:m.markiewicz@uj.edu.pl)

Dyżury:

Godziny dyżurów zostaną podane na ćwiczeniach;

Inne formy kontaktu z prowadzącym będą podane na ćwiczeniach

# Zasady prowadzenia i zaliczenia kursu „Modelowanie molekularne II” Ćwiczenia; 2012/2013

1. Wymagana jest umiejętność pracy w środowisku Linux;
2. Instrukcje do ćwiczeń oraz inne ważne materiały związane z kursem znajdują się lub są sukcesywnie umieszczane na stronie <http://bioinfo.mol.uj.edu.pl/courses>. Przed każdym ćwiczeniem należy przeczytać główne punkty odpowiedniej instrukcji oraz podaną literaturę aby świadomie wykonać ćwiczenie – prowadzący sprawdzi tę „świadomość” zadając pytania w trakcie wykonywania ćwiczeń oraz w formie pisemnego kolokwium;

## Zasady prowadzenia i zaliczenia kursu „Modelowanie molekularne II” Ćwiczenia; 2012/2013

3. Obecność na wszystkich ćwiczeniach jest **obowiązkowa**. Nie ma możliwości odrabiania ćwiczeń po zakończeniu serii wszystkich ćwiczeń; w szczególnie uzasadnionych przypadkach (choroba), za zgodą prowadzącego i w miarę wolnego miejsca, można wykonać ćwiczenie przychodząc na inną grupę tego lub podobnego kursu;
4. Spóźnienie ponad 15 min jest równoważne nieobecności na ćwiczeniach;

**Zasady prowadzenia i zaliczenia kursu  
„Modelowanie molekularne II”  
Ćwiczenia; 2012/2013**

5. W czasie ćwiczeń przy jednym komputerze mogą pracować najwyżej 2 osoby;
6. !!! Dwójka studentów, która wspólnie wykonywała ćwiczenia przygotowuje z każdego ćwiczenia jedno pisemne sprawozdanie (w sumie pięć sprawozdań) !!! , zgodnie z punktami zawartymi w instrukcji i ew. wskazówkami prowadzącego
7. Plagiaty nie będą oceniane, ich konsekwencją będzie brak zaliczenia ćwiczenia – dotyczy to również osób dających odpisać; o plagiacie będzie poinformowany pisemnie dziekan d/s dydaktycznych

**Zasady prowadzenia i zaliczenia kursu**  
**„Modelowanie molekularne II”**  
**Ćwiczenia; 2012/2013**

8. Sprawozdanie należy oddać w ciągu 8 dni po wykonaniu ćwiczenia. Spóźnienie o każdy kolejny dzień (ale **nie więcej niż 4 dni**) będzie powodować **utratę 10%** punktów oceny ćwiczenia;
9. Nie ma poprawy sprawozdania;
10. Prowadzący ma 4 dni (9-12 dzień po zakończeniu ćwiczeń) na ocenę sprawozdania i wystawienie punktacji (strona www);
11. Student ma 2 dni na „reklamację” (można e-mailem);
12. Proces oceny sprawozdania jest zakończony po 18 dniach;
13. Wszystkie sprawozdania muszą być zdeponowane i poprawione przed terminem testu końcowego;

**Zasady prowadzenia i zaliczenia kursu  
„Modelowanie molekularne II”  
ćwiczenia, seminarium i wykład; 2012/2013**

**Egzamin:**

14. Na zakończenie kursu przeprowadzony będzie egzamin pisemny sprawdzający nabytą wiedzę (przewidywany termin **ostatniego** wykładu – 28. listopada 2012, termin **egzaminu** – do ustalenia, ale nie później niż 28. stycznia 2013);
15. Test obejmuje materiał z wykładu, ćwiczeń i seminarium;
16. Do egzaminu nie będą dopuszczone osoby, które uzyskały mniej niż 60% punktów z ćwiczeń i seminarium, tj., mniej niż po 18 pt lub nie zdeponowały wszystkich sprawozdań;
17. Zasady prowadzenia oraz oceny przygotowania seminarium są osobno sprecyzowane;

**Zasady prowadzenia i zaliczenia kursu  
„Modelowanie molekularne II”  
ćwiczenia, seminarium i wykład; 2012/2013**

**Ocena końcowa:**

17. Ocena całego kursu jest obliczona z punktacji otrzymanej z ćwiczeń, seminarium i egzaminu. Maksymalna liczba punktów: ćwiczenia 30, seminarium 30, egzamin 40.

**RAZEM** – 100 punktów.

Można dostać dotatkowe punkty za aktywność na wykładach

**Zasady prowadzenia i zaliczenia kursu  
„Modelowanie molekularne II”  
ćwiczenia, seminarium i wykład; 2012/2013**

**UWAGA:**

Kto nie odpowie na któreś z pytań dotyczących „wiedzy minimalnej” otrzyma ocenę niedostateczną, bez względu na to jak napisze resztę egzaminu.

Osoby, które poprawnie odpowiedzą na pytania dotyczące „wiedzy minimalnej” oraz inne, otrzymają liczbę punktów proporcjonalną do liczby poprawnych odpowiedzi.



**Zasady prowadzenia i zaliczenia kursu BT289  
„Modelowanie molekularne II”  
ćwiczenia, seminarium i wykład; 2012/2013**

**Ocenę końcową oblicza się następująco:**

bardzo dobrze	(5.0)	: ponad 90 pkt.
plus dobrze	(4.5)	: 85 - 89 pkt.
dobrze	(4.0)	: 80 - 84 pkt.
plus dostatecznie	(3.5)	: 75 - 79 pkt.
dostatecznie	(3.0)	: 65 - 74 pkt.
niedostatecznie	(2.0)	: poniżej 64 pkt.

**Zasady oceny ćwiczeń w ramach kursu  
„Modelowanie molekularne II”; 2012/2013**

**Łączna liczba punktów za ćwiczenia 30 (5×6):**

- 1. Ocena przygotowania do ćwiczeń i wykonanie ćwiczenia:  
3.5 punktu**

Wymagana jest znajomość celu ćwiczenia oraz sprawne wykonywanie ćwiczenia, tj., ogólna znajomość kolejnych etapów ćwiczenia opisanych w instrukcji

## **Zasady oceny ćwiczeń w ramach kursu „Modelowanie molekularne II”; 2012/2013**

### **2. Ocena sprawozdania: 2.5 punktu**

W sprawozdaniu główny nacisk jest położony na **własną interpretację** oraz **analizę** otrzymywanych wyników.

Ocena aktywności odbiegającej od przeciętnej (pozytywnej lub negatywnej)  $\pm 1$  punkt.

## **Zagadnienia omawiane na seminarium**

1. Zastosowanie (potencjalne) modelowania molekularnego w badaniach biocząsteczek
2. Modele wody i problem uwodnienia biocząsteczek
3. Kanały wodne i jonowe
4. Symulacje procesów biologicznych – oddziaływania daleko-zasięgowe

**Zasady prowadzenia oraz oceny seminarium w ramach kursu  
„Modelowanie molekularne II”; 2012/2013  
(od 16. lub 23. X 2012)**

1. Na każdym spotkaniu seminaryjnym wygłoszone zostaną **trzy** referaty. Warunkiem zaliczenia seminarium jest wygłoszenie przez każdego studenta **dwóch** referatów (jednego z zastosowań i drugiego z metodyki modelowania molekularnego) na podstawie artykułów z podanych list (lub wybranego przez siebie);
2. Na każdy referat przeznaczone jest 30 min + 15 min na dyskusję. W trakcie prezentacji słuchacze mogą zadawać pytania, zgłaszać uwagi i komentować treść i formę referatu. Moderatorem dyskusji po referacie jest prowadzący seminarium. Każdy, kto zabrał głos w dyskusji musi **podać swoje nazwisko** i **dopilnować** by prowadzący je zapisał (punkty za udział w dyskusji);

## Zasady prowadzenia oraz oceny seminarium w ramach kursu „Modelowanie molekularne II”; 2012/2013

3. Referat musi być ilustrowany. Przed przystąpieniem do referowania treści, należy podać dane bibliograficzne artykułu i nazwiska autorów oraz własne;
4. Referat powinien przedstawiać **główną myśl** artykułu, jego **cel badawczy**, metody osiągnięcia tego celu, wyniki, **wnioski** oraz ich krytyczną ocenę – nie należy wchodzić w szczegóły (szczególnie nie należy zanudzać słuchaczy);

## Zasady prowadzenia oraz oceny seminarium w ramach kursu „Modelowanie molekularne II”; 2012/2013

5. Referat winien być wygłoszony, a nie odczytany (można korzystać z notatek);
6. Maksymalna liczba punktów jaką można otrzymać za seminarium wynosi **30**, z tego
  - 8 za przygotowanie dwóch referatów,
  - 4 za ich wygłoszenie,
  - 4 za ilustracje,
  - 8 za udział w dyskusjach w czasie wszystkich spotkań,
  - 6 za obecność** na wszystkich spotkaniach (każda nieobecność „kosztuje” **0.6-0.8** punktu, zależnie od liczby spotkań);

## Zasady prowadzenia oraz oceny seminarium w ramach kursu BT289 w rok akademickim 2012/2013

7. Wskazówki ogólne jak przygotować i wygłaszać referaty można znaleźć w skrypcie „Biofizyka, ćwiczenia i seminaria” pod redakcją T. Panz..., str. 109 – proszę się z nimi zapoznać i stosować się do nich;
8. Prezentacje komputerowe (PowerPoint, PDF lub inne) należy przesyłać mailem na mój adres ([marta.pasenkiewicz-gierula@uj.edu.pl](mailto:marta.pasenkiewicz-gierula@uj.edu.pl)) lub dostarczyć w inny sposób. **Ocenione będą tylko przesłane prezentacje!!**



Lista artykułów z zastosowań modelowania molekularnego  
w badaniach bioukładów

PDF-y artykułów dołączone do listy na stronie [www.kursow](http://www.kursow)

Seminarium do wykładu: **Modelowanie molekularne II**

Lista artykułów z **zastosowań modelowania molekularnego w badaniach bioukładów** do wyboru w 2012/2013 r.

**Pierwsze spotkanie** (artykuły do zreferowania)

1. Water? What's so special about it? J. L. Finney. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. B* 359, 1145–1165, 2004. (**referują dwie osoby – materiał w artykule należy podzielić na „zamykające” się części**)
2. Water conduction through the hydrophobic channel of a carbon nanotube. G. Hummer, J. C. Rasaiah and J. P. Noworyta. *Nature*. 414, 188-190, 2001.

\*\*\*\*\*

Seminarium do wykładu: **Modelowanie molekularne II**

Lista artykułów z **zastosowań modelowania molekularnego w badaniach bioukładów** do wyboru w 2012/2013 r.

**Drugie spotkanie** (artykuły do zreferowania)

3. Structure and function of water channels. Y. Fujiyoshi, K. Mitsuoka, L. B. de Groot, A. Philippsen, et. al. *Curr. Opin. Struct. Biol.* 12, 509-515, 2002. (A)
4. Principles of conduction and hydrophobic gating in K<sup>+</sup> channels. M. Ø. Jensen et al. *PNAS.* 107, 5833–5838, 2010. (B)
5. Combined transport of water and ions through membrane channels (Minireview). P. Pohl. *Biol. Chem.* 385, 921-926, 2004. (C)

**Należy zachować kolejność artykułów (A, B, C)**

\*\*\*\*\*

## Seminarium do wykładu: **Modelowanie molekularne II**

Lista artykułów z **zastosowań modelowania molekularnego w badaniach bioukładów** do wyboru w 2012/2013 r.

### **Trzecie i dalsze spotkania** (artykuły do zreferowania)

8. Lateral proton diffusion (Letter). J. Teissié. *Nature*. 379, 305-306, 1996. (A) **(8-9 referuje jedna osoba)**
9. The Grotthuss mechanism. N. Agmon. *Chemical Physics Letters*. 244, 456-462, 1995. (A') **(8-9 referuje jedna osoba)**
10. Structural proton diffusion along lipid bilayers. S. Serowy, S. M. Saparov, Y. N. Antonenko, W. Kozlovsky, V. Hagen, and P. Pohl. *Biophys. J.* 84, 1031-1037, 2003. (B)

\*\*\*\*\*

### **artykuły do wyboru**

11. Water isotope effect on the phosphatidylcholine bilayer properties: a molecular dynamics simulation study. Róg, K. Murzyn, J. Milhaud, M Karttunen and M. Pasenkiewicz-Gierula. *Phys. Chem. B* 113, 2378-2387, 2009.
12. Water-protein interactions from high-resolution protein crystallography. M. Nakasako. *Phil. Trans. R. Soc. London. B.* 359, 1191-1206, 2004.

## Seminarium do wykładu: **Modelowanie molekularne II**

Lista artykułów z **zastosowań modelowania molekularnego w badaniach bioukładów** do wyboru w 2012/2013 r.

### **artykuły do wyboru**

13. Structural biology by NMR: structure, dynamics, and interactions. P. R. L. Markwick, T. Malliavin, M. *PLoS Computational Biology*. 4, e1000168, 1-7, 2008.
14. Protein complexes: structure prediction challenges for the 21<sup>st</sup> century. P. Aloy, M. Pichaud, R. B. Russell. *Curr. Opin. Struct. Biol.* 15, 15-22, 2005.
15. Interaction of class A G protein-coupled receptors with G proteins. R. Ślusarz and J. Ciarkowski. *Acta Biochimica Polonica*. 51, 129–136, 2004.
16. A new spin on protein dynamics. L. Columbus and W. L. Hubbell. *TRENDS in Biochemical Sciences*. 27, 288-295, 2002.
17. Interactions of an anionic antimicrobial peptide with *Staphylococcus aureus* membranes. S. R. Dennison et al. *Biochemical and Biophysical Research Communications*. 347, 1006-1010, 2006.