

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

„Modelowanie molekularne II”
BT289; Biofizyka IV rok, 2014/2015

Materiały do kursu (wykłady 2013/14) 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)

„Modelowanie molekularne II”

BT289; Biofizyka IV rok, 2014/2015

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

Wykład : Środa 10:15-11:45 (Sala D105 WBBiB)

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

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

Wykład 90 min bez przerwy

Zagadnienia omawiane na wykładzie

(siedem 2-godzinnych wykładów od 15. X do 26. XI 2014):

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, 2014/2015

Ćwiczenia

Ćwiczenia: **Piątek 8:00-12:30**; od 17. X (bez 31. X) (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, 2014/2015

Ćwiczenia

Ćwiczenia (5×6 godz.) **Piątek 8:00-12:30** od 17. X (bez 31. X) (sala D112)

Tytuły ćwiczeń:

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

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 średniowanie 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, 2014/2015

Ćwiczenia

Ćwiczenia (5×6 godz.) **Piątek 8:00-12:30**, od 17. X (bez 31. X)

Materialy 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

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; 2014/2015

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; 2014/2015

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; 2014/2015

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; 2014/2015

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; 2014/2015**

Egzamin:

14. Na zakończenie kursu przeprowadzony będzie egzamin pisemny sprawdzający nabytą wiedzę (przewidywany termin **ostatniego** wykładu – 26. listopada 2014, termin **egzaminu** – do ustalenia, ale nie później niż 28. stycznia 2015);
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 pkt 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; 2014/2015**

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 dodatkowe punkty za aktywność na wykładach, ćwiczeniach i seminariach

**Zasady prowadzenia i zaliczenia kursu
„Modelowanie molekularne II”
ćwiczenia, seminarium i wykład; 2014/2015**

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; 2014/2015

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”; 2014/2015

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”; 2014/2015

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) ± 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”; 2014/2015 (21. X 2014)

1. Na każdym spotkaniu seminaryjnym wygłoszone zostaną **trzy** referaty. Na trzech pierwszych spotkaniach, artykuły są „narzucone”. Na następnych spotkaniach artykuł są do wyboru. 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);

Zasady prowadzenia oraz oceny seminarium w ramach kursu „Modelowanie molekularne II”; 2014/2015 (21. X 2014)

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”; 2014/2015

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”; 2014/2015

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,
 - 6 za ich wygłoszenie,
 - 2 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 2014/2015

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 (ppt, PDF lub inne rozpoznawalne formaty) należy przesyłać mailem na mój adres (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 są do listy na stronie www
kursu

Artykuły 1- 7 muszą być zreferowane w zadanej kolejności;
pozostałe artykuły są do wyboru

Seminarium do wykładu: **Modelowanie molekularne II**

Lista artykułów z **zastosowań modelowania molekularnego w badaniach bioukładów** do wyboru w 2014/2015 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. **(do zreferowania są następujące sekcje: 1, 2, 3, 4f, 5, 6)**
2. The Grotthuss mechanism. N. Agmon. *Chemical Physics Letters*. 244, 456-462, 1995

Drugie spotkanie (artykuły do zreferowania)

3. Water conduction through the hydrophobic channel of a carbon nanotube. G. Hummer, J. C. Rasaiah and J. P. Noworyta. *Nature*. 414, 188-190, 2001.
4. Water's Hydrogen Bond Strength. Martin Chaplin. *arXiv:0706.1355v1* [cond-mat.soft], 2007 **(mogą referować dwie osoby)**

Seminarium do wykładu: **Modelowanie molekularne II**

Lista artykułów z **zastosowań modelowania molekularnego w badaniach bioukładów** do wyboru w 2014/2015 r.

Trzecie spotkanie (artykuły do zreferowania)

5. 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)**
6. The Mechanism of Na⁺/K⁺ selectivity in mammalian voltage-gated sodium channels based on molecular dynamics simulation. M. Xia et al. *Biophys. J.* 104 , 2401-2409, 2013. **(B)**
7. α -Helical structures drive early stages of self-assembly of amyloidogenic amyloid polypeptide aggregate formation in membranes. M. Pannuzzo, A. Raudino, D. Milardi, C. La Rosa, and M. Karttunen. *Scientific Reports* 3 : 2781, 1-10, 2013. **(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 2014/2015 r.

artykuły do wyboru

8. 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.
9. 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 2014/2015 r.

artykuły do wyboru

10. Strong preferences of dopamine and l-dopa towards lipid head group: importance of lipid composition and implication for neurotransmitter metabolism. A. Orłowski, M. Grzybek, A. Bunker, M. Pasenkiewicz-Gierula, I. Vattulainen, P. T. Männistö and T. Róg. *J. Neurochemistry*, 122, 681–690, 2012
11. Structural biology by NMR: structure, dynamics, and interactions. P. R. L. Markwick, T. Malliavin, M. *PLoS Computational Biology*. 4, e1000168, 1-7, 2008.
12. Protein complexes: structure prediction challenges for the 21st century. P. Aloy, M. Pichaud, R. B. Russell. *Curr. Opin. Struct. Biol.* 15, 15-22, 2005.
13. A new spin on protein dynamics. L. Columbus and W. L. Hubbell. *TRENDS in Biochemical Sciences*. 27, 288-295, 2002.
14. Interactions of an anionic antimicrobial peptide with *Staphylococcus aureus* membranes. S. R. Dennison et al. *Biochemical and Biophysical Research Communications*. 347, 1006-1010, 2006.

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

Lista artykułów z **metodologii** badań bioukładów molekularnych; do wyboru, w 2014/15 roku.

1. Atomic-level characterization of the structural dynamics of proteins. David E. Shaw, *et al.*, *Science* 330, 341-346, 2010.
2. Regulation of the protein-conducting channel by a bound ribosome. J. Gumbart, L. G. Trabuco, E. Schreiner, E. Villa, K. Schulten. *Structure* 17, 1453–1464, 2009.
3. Common structural transitions in explicit-solvent simulations of villin headpiece folding. P. L. Freddolino, K. Schulten. *Biophys. J.* 97, 2338–2347, 2009.
4. Bridging implicit and explicit solvent approaches for membrane electrostatics. J.-H. Lin, N. A. Baker, and J. A. McCammon. *Biophys. J.* 83, 1374-1379, 2002.
5. Constant-pH molecular dynamics simulations: a test case of succinic acid. M. Dlugosz, J. M. Antosiewicz. *Chemical Physics* 302, 161–170, 2004.
6. Lipid bilayer pressure profiles and mechanosensitive channel gating. J. Gullingsrud and K. Schulten. *Biophys. J.*, 86, 3496–3509, 2004.
7. Strength of the C α H \cdots O hydrogen bond of amino acid residues. S. Scheiner, T. Kar, and Y. Gu. *J. Biol. Chem.* 276, 9832–9837, 2001.

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

Lista artykułów z **metodologii** badań bioukładów molekularnych; do wyboru, w 2014/15 roku.

8. Mechanical strength of 17 134 model proteins and cysteine slipknots. M. Sikora, J. I. Sułkowska, M. Cieplak. *PLoS Computational Biology*. 5, 1-15, 2009.
9. Normal Modes and Essential Dynamics. in: Methods in molecular biology, S. Hayward and B. L. de Groot. vol 443, Molecular modelling of proteins 89-106, 2008.
10. The volume of atoms on the protein surface: Calculated from simulation, using Voronoi polyhedra. M. Gerstein, J. Tsai, M. Levitt. *J. Mol. Biol.* 249, 955-966, 1995.
11. Unusual biophysics of intrinsically disordered proteins. V. N. Uversky. *Biochim. Biophys. Acta* 1834, 932–951, 2013.
12. Do all backbone polar groups in proteins form hydrogen bonds? P. J. Fleming and G. D. Rose. *Protein Science*, 14, 1911–1917, 2005.