



Struktura biomakromolekuł i ich modelowanie

Cykl „Masterclass in biology”

Prof. dr hab. Andrzej Koliński

<http://www.biocomp.chem.uw.edu.pl>

1. Polimery – elementy statystyki konformacyjnej i termodynamiki
 - polimery syntetyczne i naturalne, izomerie polimerów
 - konformacje polimerów liniowych, pojęcie kłębka statystycznego
 - przejście od kłębka losowego do formy globularnej
 - dyfuzja polimerów
 - proste modele obliczeniowe układów polimerowych i co z nich wynika
2. Polimery naturalne – czym się różnią od syntetycznych?
3. Kwasy nukleinowe
 - DNA, struktura chemiczna i kod genetyczny
 - DNA, struktura przestrzenna i jej rola
 - RNA, różne formy i funkcje, struktura przestrzenna tRNA
4. Białka globularne
 - struktura chemiczna, konformacje łańcucha polipeptydowego
 - poziomy organizacji struktury białek globularnych
 - klasyfikacje strukturalne białek globularnych
 - sekwencja, struktura, funkcja biologiczna (relacje ewolucyjne)
5. Podstawowe techniki modelowania molekularnego w zastosowaniu do biomakromolekuł
 - klasyczna mechanika molekularna
 - metody Monte Carlo
 - inne (modelowanie mezoskopowe, kombinacje różnych metod modelowania)
6. Modelowanie białek
 - metody klasyczne
 - metody wykorzystujące relacje ewolucyjne (modelowanie porównawcze)
 - metody wieloskalowe
 - dynamika i termodynamika białek
7. Inne biomakromolekuły (białka membranowe, membrany, biopolimery strukturalne)
8. Oddziaływania międzymakromolekularne

Przykładowa literatura:

1. <http://www.biocomp.chem.uw.edu.pl> (przykłady, filmy, prezentacje)
2. P. G. de Gennes, „Scaling concepts in polymer physics”, Cornell University Press, Ithaca, New York, 1979
3. C. Branden, J. Tooze, „Introduction to protein structure”, Garland Pub, New York, 1999
4. T. E. Creighton, „Proteins, structures and molecular properties”, W. H. Freeman, New York, 1993
5. K. Binder, D. W. Heermann, „Monte Carlo simulations in statistical physics”, Springer, New York, 2002.
6. D. Frenkel, B. Smit, „Understanding molecular simulations. From algorithms to applications”, Academic Press, San Diego, California, 1996