



## DALYKO APRAŠAS

Dalyko pavadinimas	Kodas
<b>Baltymų ir vaistų molekulinė biofizika</b>	

Dėstytojas	Padalinys
<b>Koordinuojantis:</b> Prof. Daumantas Matulis	VU Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, Vilnius

Studijų pakopa	Dalyko lygmuo	Dalyko tipas
I pakopos studijos	-	Privalomasis, Pasirenkamas, Individualių studijų (ne studijų programos studentams)

Įgyvendinimo forma	Vykdymo laikotarpis	Vykdymo kalba (-os)
Paskaitos ir seminarai auditorijoje. Pratybos su kompiuteriais	pavasaris	Lietuvių

Reikalavimai studijuojančiajam	
<b>Išankstiniai reikalavimai:</b> studentas turi būti išklausęs dalykus: Biochemija, bendroji, neorganinė, organinė, fizikinė chemijos; fizika, matematika	<b>Gretutiniai reikalavimai (jei yra):</b> nėra

Dalyko apimtis kreditais	Visas studento darbo krūvis	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiško darbo valandos
5	130	Paskaitos – 24 Seminarai – 12 Pratybos – 12	82

Dalyko tikslas: studijų programos ugdomos kompetencijos		
Tikslas – įgyti žinių ir suprasti pagrindinius baltymų funkcinio veikimo principus, baltymų struktūrą, stabilumą ir sąveiką su juos supančiomis molekulėmis. Aptariamas baltymu-taikiniu pagrįstas vaistų veikimas bei kūrimas biotermodinaminiais metodais.		
Dalyko studijų siekiniai	Studijų metodai	Vertinimo metodai
<b>Bendrosios kompetencijos</b> Sėkmingai baigęs šį modulį studentas gebės: kritiškai ir savikritiškai mąstyti; analizuoti ir sintezuoti; gebėti taikyti žinias praktikoje	Paskaitos, vadovėlio skyrių aptarimas, pratybos.	Užduočių ir savarankiško darbo vertinimas.
<b>Dalykinės kompetencijos</b> Sėkmingai baigęs šį modulį studentas gebės: Gebės taikyti matematinius modelius paprastų biofizikinių rezultatų teoriniam išaiškinimui. Gebės taikyti modelius eksperimentiniams rezultatams suprasti. Gebės paaiškinti baltymų molekulių struktūrą ir sąveikų pusiausvyrą su natūraliomis ir vaistų molekulėmis.	Paskaitos, straipsnių aptarimas ir pratybos auditorijoje ir savarankiškas darbas.	pratybų vertinimas, vertinimas per apklausą žodžiu. Tarpinis egzaminas kurso viduryje raštu. Dalyko pabaigoje – egzaminas raštu.

Temos	Kontaktinio darbo valandos							Savarankiškų studijų laikas ir užduotys	
	Paskaitos	Konsultacijos	Seminarai	Pratybos	Laboratoriniai darbai	Praktika	Visas kontaktinis darbas	Savarankiškas darbas	Užduotys
1. Baltymų struktūra. Bendrieji principai, konformacijos, struktūriniai motyvai ir domenai, globuliniai, fibriliniai ir membraniniai baltymai	2		1				3	5	4 skyrius
2. Energija ir tarpmolekulinės jėgos. Termodinamika, šiluminė talpa, tarpmolekulinės sąveikos energetika	2		1				3	5	6 skyrius
3. Entropija. Multipliškumo skaičiavimas. Statistinis entropijos apibrėžimas.	2		1				3	5	7 skyrius
4. Energijos ir entropijos susiejimas per Bolcmano pasiskirstymą. Termodinaminis entropijos apibrėžimas.	2		1				3	5	8 skyrius
5. Buferių <b>pratybos</b> . Frakcijos, Sileno diagrama, baltymo krūvio skaičiavimas, buferio pKa, Gibso energija, entalpija, entropija				3			3	5	
6. Laisvoji energija. Gibso ir Helmholco laisvosios energijos. Formavimosi laisvoji energija, darbas	2		1				3	6	9 skyrius
7. Cheminis potencialas ir judėjimas link pusiausvyros. Pusiausvyros konstanta. Rūgščių-bazių pusiausvyra.	2		1				3	5	10 skyrius
8. Baltymo-ligando jungimosi frakcijos <b>pratybos</b> . Morisono, Hilo, laisvosios frakcijos lygtys ir jų palyginimas. Solver funkcija, Gibso energija, RT, jungimosi konstanta, entalpija				3			3	5	
9. Molekulinis atpažinimas. Vaistų sąveikos su baltymais termodinamika. Jungimosi izoterma. Priešvėžiniai ir prieš ŽIV vaistai.	2		1				3	6	12 skyrius
10. Baltymo vnyiojimosi <b>pratybos</b> . Gibso energijos priklausomybė nuo T. Išsivyniojimo frakcija, Šiluminė talpa, entalpija, entropija, denatūracija šalčiu.				3			3	5	
11. Makromolekulių atpažinimo specifiškumas. Komprimisas tarp specifiškumo ir afiniškumo. Sąveikos tarp baltymų.	2		1				3	5	13 skyrius
12. Baltymų-ligandų sąveikos struktūrų <b>pratybos</b> su Accelrys ir Chimera programomis, druskų tirpimo termodinamika.				3			3	5	

13. Alosterija. Kooperatyvumas, ultrajautrumas. Hemoglobino alosterija.	2		1				3	5	14 skyrius
14. Baltymo-ligando sąveikos kinetika. Reakcijos laikas ir pusperiodis.	2		1				3	5	15 skyrius
15. Baltymų susivyniojimas. Baltymo susivyniojimo laisvoji energija (dalis 10 skyriuje). Šaperonai.	2		1				3	5	18 skyrius
16. Difuzija ir transportas. Atsitiktinis judėjimas, difuzijos makroskopinis aprašymas, klampumas.	2		1				3	5	17 skyrius
<b>Iš viso</b>	<b>24</b>		<b>12</b>	<b>12</b>			<b>48</b>	<b>82</b>	<b>130 val.</b>

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
Straipsnių aptarimas	25 %	Semestro metu	Studentas kiekvienai paskaitai perskaito vadovėlio skyrių. Paskaitos pradžioje kiekvienas papasakoja/pristato skyriuje nagrinėjamas detales. Vertinamas dalyvavimas, aktyvumas, dėstymas. Vertinama pagal dešimtbalę sistemą 10 : Puikios žinios ir gebėjimai. 9: Labai geros žinios ir gebėjimai. 8: Geros žinios ir gebėjimai, gali būti neesminių klaidų. 7: Vidutiniškos žinios ir gebėjimai, yra nereikšmingų klaidų. 6: Patenkinamos žinios ir gebėjimai, yra klaidų. 5: Silpnos žinios ir gebėjimai, kurie dar tenkina minimalius reikalavimus. Yra daug klaidų. 0–4: Netenkinami minimalūs reikalavimai
Pratybos	25 %	Semestro metu	Vertinami e-paštu atsiųsti pratybų sprendimai, kuriuose matematiniai modeliai taikomi pagrindiniams nagrinėjamiems kurso klausimams analizuoti ir giliau suprasti. Vertinama pagal dešimtbalę sistemą 10 : Puikios žinios ir gebėjimai. 9: Labai geros žinios ir gebėjimai. 8: Geros žinios ir gebėjimai, gali būti neesminių klaidų. 7: Vidutiniškos žinios ir gebėjimai, yra nereikšmingų klaidų. 6: Patenkinamos žinios ir gebėjimai, yra klaidų. 5: Silpnos žinios ir gebėjimai, kurie dar tenkina minimalius reikalavimus. Yra daug klaidų. 0–4: Netenkinami minimalūs reikalavimai,
Kontrolinis darbas	25 %	Semestro metu	Kontrolinį darbą raštu sudaro 25 klausimai. Vertinama atsakymų į pateiktus atvirus ir uždarus klausimus išsamumas ir informacijos pateikimo logiškumas bei teisingumas. Vertinama pagal dešimtbalę sistemą. 10 – ≥92% teisingų atsakymų 9 – 82-91% teisingų atsakymų 8 – 74-81% teisingų atsakymų 7 – 66-73% teisingų atsakymų 6 – 58-65% teisingų atsakymų 5 – 50-57% teisingų atsakymų 4 – 40-49% teisingų atsakymų 3 – 30-39% teisingų atsakymų 2 – 20-29% teisingų atsakymų 1 – ≤19% teisingų atsakymų

Galutinis egzaminas raštu	25 %	Egzaminų sesijos metu.	Egzaminą raštu sudaro 25 klausimai. Vertinama atsakymų į pateiktus atvirus ir uždarus klausimus išsamumas ir informacijos pateikimo logiškumas bei teisingumas. Vertinama pagal dešimtbalę sistemą. 10 – ≥92% teisingų atsakymų 9 – 82-91% teisingų atsakymų 8 – 74-81% teisingų atsakymų 7 – 66-73% teisingų atsakymų 6 – 58-65% teisingų atsakymų 5 – 50-57% teisingų atsakymų 4 – 40-49% teisingų atsakymų 3 – 30-39% teisingų atsakymų 2 – 20-29% teisingų atsakymų 1 – ≤19% teisingų atsakymų
---------------------------	------	------------------------	---

Autorius	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio Nr. Ar leidinio tomas	Leidimo vieta ir leidykla ar internetinė nuoroda
<b>Privalomoji literatūra</b>				
1. Kuriyan, J., Konforti, R., Wemmer, D.	2013	The Molecules of Life		Garland Science
<b>Papildoma literatūra</b>				
1.D. Matulis	2008	Baltymų fizikinė chemija		KMU leidykla
2. Klotz, Rozenberg	2000	Chemical Thermodynamics		Wiley
3. Dill, K., Bromberg, S.	2011	Molecular Driving Forces. Statistical Thermodynamics in Chemistry and Biology.		Garland Science
4. Bahar, I., Jernigan, R.L., Dill, K.A.	2017	Protein Actions. Principles and Modeling		Garland Science