

## DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas	Kodas
<b>Makromolekulių struktūrinė biologija (Biologinių makromolekulių rentgenostruktūrinė analizė)</b>	

Dėstytojas (-ai)	Padalinys (-iai)
<b>Koordinuojantis: Doc. dr. Saulius GRAŽULIS</b>	Gamtos mokslų fakulteto Biochemijos ir molekulinės biologijos katedra
<b>Kitas (-i):</b>	

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) lygmuo	Dalyko (modulio) tipas
II-a	1/1	Pasirenkamasis

Įgyvendinimo forma	Vykdymo laikotarpis	Vykdymo kalba (-os)
Paskaitos, praktikos darbai	2-as semestras, pavasario	Lietuvių (anglų)

Reikalavimai studijuojančiajam	
<b>Išankstiniai reikalavimai:</b> Turi būti išklaustyti biochemijos, organinės chemijos, fizikinės chemijos, bendrosios fizikos, matematinės analizės, tiesinės algebros kursai.	<b>Gretutiniai reikalavimai (jei yra):</b> Pageidautina darbo patirtis Unix ar Linux operacinėse sistemose; bazinės failų sistemos ir komandų interpretatoriaus žinios.

Dalyko (modulio) apimtis kreditais	Visas studento darbo krūvis	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiško darbo valandos
4	112	48	64

Dalyko (modulio) tikslas: studijų programos ugdomos kompetencijos		
Sėkmingai baigę kursą, studentai/-ės įgys šiuos gebėjimus: Specialieji gebėjimai: <ul style="list-style-type: none"> <li>• suvokimą apie biologinių makromolekulių struktūrinės analizės metodus ir jų savarankiško taikymo galimybes;</li> <li>• sugebėjimą analizuoti, interpretuoti, kritiškai ir sistemiškai vertinti struktūrinę informaciją, pateikti moksliskai pagrįstas išvadas;</li> <li>• gebėjimą integruoja skirtingų mokslo sričių žinias;</li> </ul> Bendrieji gebėjimai: <ul style="list-style-type: none"> <li>• patobulins analitinį ir kritinį mąstymą;</li> <li>• pagilins saviugdą ir savarankiško studijavimo įgūdžius;</li> <li>• treniruos gebėjimą pristatyti struktūrinės biologijos žinias ir problemų sprendimus raštu ir žodžiu;</li> <li>• pagilins gebėjimą dalyvauti mokslinėje diskusijoje.</li> </ul>		
Dalyko (modulio) studijų siekiniai	Studijų metodai	Vertinimo metodai
Apibūdins šiuolaikinės rentgenostruktūrinės analizės ir kitų struktūrinės analizės metodų teikiamas galimybes biologinių makromolekulių analizei; geba parinkti tinkamą struktūrinės analizės metodą pateikti užduočiai.	Paskaitos, praktikos darbai	Tarpinis egzaminas, egzaminas, praktikos darbų rezultatų aprašymas ir praktikos darbų gynimas.
Pagal surinktus Rentgeno spindulių sklaidymo duomenis (difrakcijos vaizdus, HKLFobs duomenis) sugebės savarankiškai sukurti baltymo struktūros modelį.	Paskaitos, praktikos darbai	Tarpinis egzaminas, egzaminas, dalyko temos pristatymas seminare, praktikos darbų rezultatų aprašymas ir darbų gynimas.

Sugebės įvertinti savo sukonstruoto arba kitų tyrėjų publikacijose pateikto modelio kokybę ir patikimumą.	Paskaitos, straipsnių ir PDB archyvo struktūrų analizė, praktikos darbai	Tarpinis egzaminas, egzaminas, dalyko temos pristatymas seminare, praktikos darbų rezultatų aprašymas ir darbų gynimas.
Gebės kritiškai analizuoti ir įvertinti struktūrinę informaciją, gaunamą rengenostuktūrinės analizės ir kitais metodais, ir panaudoti šią informaciją mokslinėms išvadoms gauti biologijos srityje.	Straipsnių ir PDB struktūrų analizė, straipsnių ir PDB archyvo struktūrų analizė, praktikos darbai	seminarai, praktikos darbai, praktikos darbų rezultatų aprašymas ir darbų gynimas.

Temos	Kontaktinio darbo valandos						Savarankiškų studijų laikas ir užduotys		
	Paskaitos	Konsultacijos	Seminarai	Pratybos	Praktikos darbai	Praktika	Visas kontaktinis darbas	Savarankiškas darbas	Užduotys
<b>1. Struktūrinės informacijos svarba ir jos gavimo metodai</b>	4				2		6	8	Kritiškas mokslinių straipsnių ir knygų iš einamos temos studijavimas; Savarankiškas temos studijavimas.
1a. Struktūrinė informacija apie (makro)molekules, jos tipai ir panaudojimas	2				1			4	
1b. Biologinių makromolekulių struktūrų nustatymo būdai: eksperimentiniai metodai (BMR, EPR, EXAFS/XANES, RA)	2				1			4	
<b>2. Rentgenostruktūrinės analizės teorija</b>	8				4		12	16	Kritiška mokslinių straipsnių ir rekomenduotos literatūros medžiagos iš einamos temos analizė; Savarankiškas temos studijavimas.
2a. Difrakcijos teorija	4				2			8	
2b. Fazių problema ir jos sprendimo būdai	4				2			8	
<b>3. Kristalų simetrija</b>	6				3		9	12	Kritiškas rekomenduotos literatūros ir Žiniatinklio medžiagos einamąją temą išsivavinimas; Savarankiškas temos studijavimas.
3a. Simetrijos grupės plokštumoje ir erdvėje	2				1			4	
3b. Kristalografinės simetrijos elementai	2				1			4	
3c. Simetrijos panaudojimas ir interpretacija; Tarptautinės kristalografinės lentelės	2				1			4	
<b>4. Makromolekulių kristalų analizė</b>	6				3		9	12	Kritiškas rekomenduotos literatūros, mokslinių straipsnių ir Žiniatinklio medžiagos einamąją temą išsivavinimas; Duomenų bazių informacijos analizė; Praktinis duomenų apdorojimas, struktūrų sprendimas Savarankiškas temos studijavimas.

4a. Kristalų auginimo metodai	1							
4b. Difrakcijos eksperimentas, duomenų surinkimas	1			1			4	
4c. Difrakcijos duomenų apdorojimas, fazių nustatymas	2			1			4	
4d. Modelio konstravimas ir patikslinimas	2			1			4	
<b>5. Struktūriniai modeliai ir jų interpretacija</b>	<b>8</b>			<b>4</b>		<b>12</b>	<b>16</b>	Kritiškas rekomenduotos literatūros, mokslinių straipsnių ir Žiniatinklio medžiagos einamąja tema įsisavinimas; Duomenų bazių informacijos analizė; Praktinis duomenų apdorojimas, struktūrų sprendimas Savarankiškas temos studijavimas.
5a. Duomenų ir modelio kokybės rodikliai	2			1			4	
5b. Publikuotos struktūros – struktūrinių modelių duomenų bazės (PDB, NDB, COD, etc.)	2			1			4	
5c. Modelių sugretinimas ir palyginimas	2			1			4	
5d. Modelių biocheminė interpretacija	2			1			4	
<b>Iš viso</b>	<b>32</b>			<b>16</b>		<b>48</b>	<b>64</b>	

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
Darbas paskaitose (paskaitų apklausos)	10	prieš kiekvieną praktikos darbą	Testas iš 4 klausimų, apimančių jau išklaustų paskaitų medžiagą. Sumuojamas balų už teisingai atsakytus klausimus skaičius; maksimali visų tokių apklausų balų suma – 100 balų. Paprastai organizuojamas virtualioje mokymosi aplinkoje, bet gali būti panaudotas testas raštu.
Tarpinis egzaminas	30	semestro vidurys (po maždaug pusės paskaitų)	Testas (virtuali mokymosi aplinka) iš 50 klausimų, apimančių 1-3 temas. Maksimali balų už atsakymus suma – iki 300 balų.
Praktikos darbo ataskaitos pristatymas	30	Paskutinė semestro savaitė	Studentai įkelia į virtualią mokymosi aplinką savo praktinio darbo ataskaitą ir perskaito 5–10 min. pranešimą grupėje. Darbo ataskaitą būtina pateikti pagal VU darbų apipavidalinimo taisykles. Vertinimo kriterijai: pasiektas praktikos darbo tikslas – iki 100 balų; bendros dalyko žinios ir temos supratimas (atsakymai į 3 klausimus žodžiu iš darbo temos) – iki 100 balų; darbo apipavidalinimas – iki 50 balų; pranešimo dėstymas – iki 50 balų; viso – iki 300 balų.
Egzaminas	30	Egzaminų sesija	Testas (virtuali mokymosi aplinka) iš 50 klausimų, apimančių visas kurso temas. Maksimali balų už atsakymus suma – iki 300 balų.
Viso	100		Galutinis pažymys yra suminis paskaitų apklausų, tarpinio kontrolinio, praktikos darbo ataskaitos ir egzamino balas (iki 1000 balų), padalintas iš 100, apvalinamas iki artimiausio didesnio sveiko skaičiaus (pvz., 901 balas apvalinami iki galutinio įvertinimo 10).

Autorius	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio Nr. ar leidinio tomas	Leidimo vieta ir leidykla ar internetinė nuoroda
<b>Privalomoji literatūra</b>				
S. Gražulis	2012	Virtuali kurso mokymo aplinka: Biologinių makromolekulių rentgenostruktūrinė analizė		<a href="http://saulius-grazulis.lt/moodle/">http://saulius-grazulis.lt/moodle/</a> .
wwPDB konsorciumas	2013	PDB, The Protein Data Bank		<a href="http://www.pdb.org/">http://www.pdb.org/</a>
	1971 – 2013	<i>Straipsniai, aprašantys struktūras, cituojami PDB</i>		<a href="http://www.pdb.org/">http://www.pdb.org/</a>
Jan Drenth	1994	Principles of Protein X-Ray Crystallography (Springer Advanced Texts in Chemistry)		Springer Verlag, New York, ISBN 0-387-94091-X
Duncan McRee	1999	Practical Protein Crystallography, Second Edition		Academic Press/Elsevier, London, ISBN-13 978-0-12-486052-0
Theo Hahn (Editor)	2002	International Tables for Crystallography, Brief Teaching Edition of Volume A		Kluwer Academic Publishers Dordrecht/Boston/London, ISBN 0-7923-6591-7
<b>Papildoma literatūra</b>				
IUCr	2013	IUCr Educational resources		<a href="http://www.iucr.org/education">http://www.iucr.org/education</a> , <a href="http://www.iucr.org/education/pamphlets">http://www.iucr.org/education/pamphlets</a>
Jack D. Dunitz	1995	X-Ray analysis and the Structure of Organic Molecules		Verlag Helvetica Chimica Acta, Basel, ISBN 3-906390-14-4
Carmelo Giacovazzo (Editor), et al.	1995	Fundamentals of Crystallography		Oxford university Press, Oxford, New York, ISBN 0-19-855578-4
Theo Hahn (Editor)	2002	International Tables for Crystallography, Volume A		Kluwer Academic Publishers Dordrecht/Boston/London, ISBN 0-7923-6590-9