UČNI NAČRT PREDMETA / COURSE SYLLABUS	
Predmet:	OSNOVE STRUKTURE BIOLOŠKIH MOLEKUL
Course Title:	INTRODUCTION TO BIOMOLECULAR STRUCTURE

Študijski program in stopnja Study Programme and Level	Študijska smer Study Field	Letnik Academic Year	Semester Semester
UN Biokemija, 1. stopnja	/	2.	4.
USP Biochemistry, 1st Cycle	/	2nd	4th

Vrsta predmeta / Course Type: obvezni / Mandatory

Univerzitetna koda predmeta / University Course Code: BK118S

Predavanja Lectures	Seminar Seminar	Vaje Tutorial	Klinične vaje Work	Druge oblike študija	Samost. delo Individual Work	ECTS
45	30	/	/	/	75	5

Nosilec predmeta / Lecturer: prof. dr. Barbara Hribar Lee / Dr. Barbara Hribar Lee, Full Professor

Jeziki / Languages:

Predavanja / Lectures:	**slovenski / Slovenian**
Vaje / Tutorial:	**slovenski / Slovenian**

Pogoji za vključitev v delo oz. za opravljanje študijskih obveznosti:	Prerequisites:
Študent oz. kandidat mora imeti predmet opredeljen kot študijsko obveznost.	The course has to be assigned to the student.

Vsebina:	Content (Syllabus outline):
Uvod. Osnovni gradniki atomov. Poskusi, ki kažejo na kvantizacijo energije. Dvojnost narave snovi in princip nedoločljivosti. Razvoj modela atoma. Atomi v magnetnem polju. Valovna funkcija in Schrödingerjeva enačba za enostavne sisteme. Pomen tunelskega efekta v biokemiji. Sevanje in absorbcija svetlobe – izbirna pravila. **Atomi**. Opis vodikovega atoma z valovno funkcijo. Orbitalna in spinska vrtilna količina. Variacijska metoda in metoda motnje. Večelektronski atomi - Paulijev princip in Hundovo pravilo. Hartree-Fockova metoda za atome.	**Introduction.** Fundamental particles in atom. Energy quantization experiments. Wave-particle experiments and Indeterminacy principle. Models of atoms. Atoms in magnetic field. Wave function and Schrödinger equation for simple model systems. The role of quantum tunneling in biochemistry. Radiation and absorption – selection rules. **Atoms.** Wave function for hydrogen atom. The orbital angular momentum and spin. Variational method and perturbation theory. Many-electron atoms – Pauli exclusion principle and Hund's rules. Hartree-Fock method for atoms.

Molekule. Metoda valenčnih vezi, molekula H_2 z metodo valenčnih vezi. Metoda molekulskih orbital. Hibridne molekulske orbitale. Polarnost molekulskih orbital. Elektronegativnost. Hartree-Fockova metoda za molekule. Bazni seti. Grafična predstavitev biološko pomembnih molekul. Elektrostatski potencial in hidrofobnost. Semiempirične metode. Mehanski modeli in polja sil. Osnovne zakonitosti zvijanja proteinov.	**Molecules.** Valence bond theory, application to H2 molecule. Molecular orbital method. Hybride molecular orbitals. The polarity of molecular orbitals. Electronegativity. Hartree-Fock method for molecules. Basis sets. Graphical representation of biologically important molecules. Electrostatic potential and hydrophobicity. Semiempirical methods. Molecular mechanics and force fields. The basic principles of protein folding.

Temeljna literatura in viri / Readings:

- J. Koller, Struktura atomov in molekul (bolonjski program), FKKT, Ljubljana 2010, 209 str., (90 %)
- B. H. Bransden, C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, Addison-Wesley, 2003 (20%)
- A. R. Leach, *Molecular Modelling, Principles and Applications*, Longman, England, 1996 (10%)

Dopolnilna literatura:

- J. Koller, Struktura atomov in molekul – zbirka nalog z rešitvami, FKKT, Ljubljana 2002, 121 str.
- K. A. Dill, S. Bromberg, *Molecular Driving Forces*, Garland Science, 2003, 666 str. (20%).

Cilji in kompetence:	**Objectives and Competences:**
Predmet je del področja kvantna kemija, ki je uporaba metod kvantne fizike v kemiji in biokemiji. Cilj predmeta je, da se študent seznani z osnovnimi principi kvantne mehanike in uporabo le-teh ter novim načinom gledanja na svet mikrokozmosa. Specifične kompetence: osnovno znanje za samostojno teoretično delo na področju strukturne biokemije, strukture proteinov, membran itd.	**Learning outcomes**: Understanding the basic principles of quantum mechanics and the use of these principles in learning the new perspectives of looking at the micro cosmos. **Competence**s: Ability to interpret the atomic structure and the structure of simple molecules. Directing students to independent theoretical work.

Predvideni študijski rezultati:	**Intended Learning Outcomes:**
<u>Znanje in razumevanje</u> Študent se pri predmetu nauči osnov kvantne mehanike, navadi se na abstraktno razmišljanje (marsikateri pojav nima klasične razlage), spozna teoretično ozadje biokemijskih principov, nauči se vrednotiti rezultate teoretičnih računov. Spozna povezavo med klasično in kvantno fiziko in vzroke strukture biološko pomembnih molekul	<u>Knowledge and Comprehension</u> The student learns the basics of quantum mechanics and abstract thinking, gets to know the theoretical basis for the biochemistry principles and learns to assess the theoretical results. The student discovers the correlation between classical and quantum physics, and the reasons for the structure of the biologically important molecules.

ter kje je potrebno uporabiti kvantno in kje je dovolj klasična fizika.	
Uporaba Poznavanje principov, ki jih posreduje ta predmet, je nujna osnova za vse teoretične študije v biokemiji. Študent se spozna z enačbami, s katerimi lahko obravnava atome, molekule in molekulske sisteme, rezultati katerih pa so fizikalno-kemijske količine, ki jih lahko izmerimo.	Application The knowledge of the principles of this subject is the basics for all the theoretical studies in the biochemistry. The student gets familiar with the equations that describe the properties of atoms and molecules, resulting in the physical chemistry properties of the systems.
Refleksija Študent si pridobi občutek, da se obnašanja zelo majhnih (kvantnih) delcev ne da vedno predstavljati s pojmi iz vsakodnevnega življenja in se navadi abstraktnega gledanja. Nauči se tudi, kje je dovoljeno obravnavanje sistemov s klasično fiziko.	Analysis The students learn the abstract thinking process, realizing that the quantum systems do not have an analogy in the everyday life. The students get to know where the quantum mechanics needs to be used in the place of classical physics.
Prenosljive spretnosti Pri predmetu se študenti naučijo prepoznavati problem, ga rešiti s pomočjo katerega od komercialnih računalniških programov in na koncu interpretirati rezultate. Poseben poudarek je na kritičnem ovrednotenju dobljenih rezultatov. Naučijo se uporabe domače in tuje literature ter podajanja zaključenega dela v pisni obliki.	Skill-transference Ability The students learn to recognize the problem, to formulate it in the mathematical language, and to interpret the results. Special attention is paid to critical assessment of the obtained results. They learn how to use the literature and to present a written report.

Metode poučevanja in učenja:	**Learning and Teaching Methods:**
Predavanja Seminar (računske naloge iz predelane snovi)	- Lectures - Seminars (Problem solving)

Načini ocenjevanja:	Delež (v %) / Weight (in %)	**Assessment:**
Pisni (nadomestita ga lahko dva pozitivno ocenjena kolokvija) in ustni izpit.	**100%**	Written (can be substituted with two positively graded partial tests) and oral exam.

Reference nosilca / Lecturer's references:

- **HRIBAR, Barbara**, DILL, Ken A., VLACHY, Vojko. Receptacle model of salting-in by tetramethylammonium ions. J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys., 2010, vol. 114, no. 46, str. 15085-15091
- LUKŠIČ, Miha, URBIČ, Tomaž, **HRIBAR, Barbara**, DILL, Ken A. Simple model of hydrophobic hydration. J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys., 2012, vol. 116, no. 21, str. 6177-6186
- JARDAT, Marie, **HRIBAR, Barbara**, DAHIREL, Vincent, VLACHY, Vojko. Self-diffusion and activity coefficients of ions in charged disordered media. J. chem. phys., 2012, vol. 137, no. 11, art. no. 114507 (9 str.)