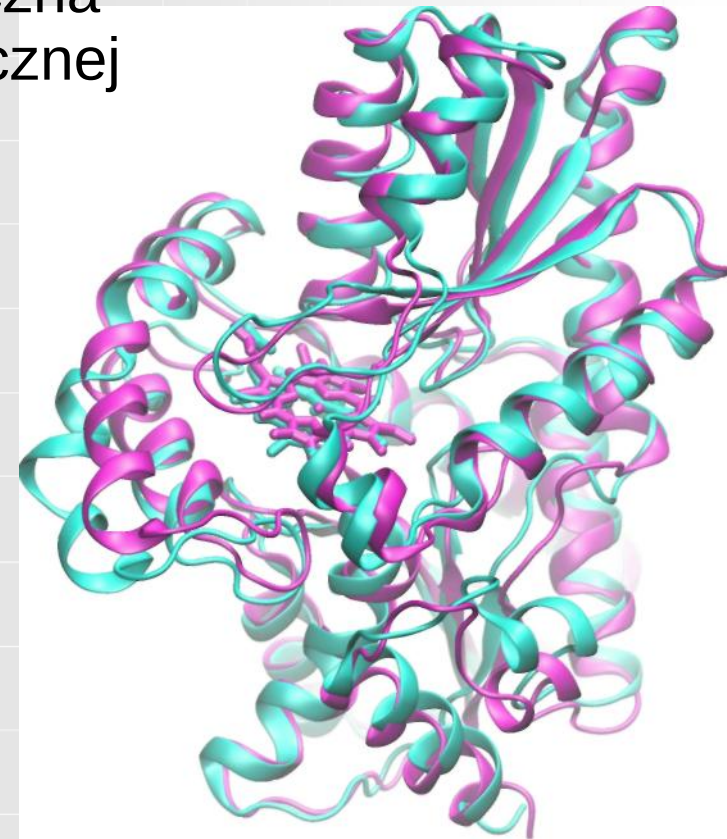




# Bioinformatics

- Pierwsza w kraju interdyscyplinarna, anglojęzyczna specjalność na uczelni technicznej
- połączenie wykształcenia z zakresów:
  - bioinformatyki
  - biotechnologii
  - modelowania molekularnego
  - chemii medycznej



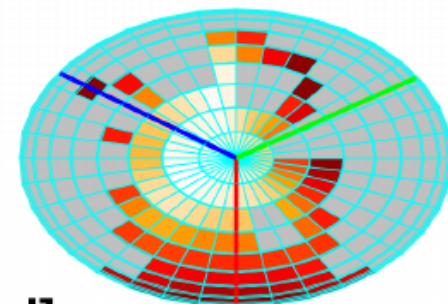
Modelowanie struktury przez homologię



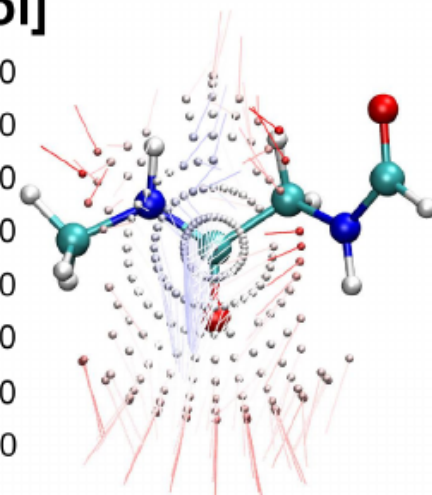
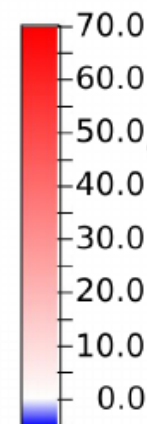
# Bioinformatics

- Żywiotyowy rozwój technik informatycznych stosowanych w chemii i biologii.
- Nowe perspektywy wprowadzania innowacji w biotechnologii:
  - projektowanie biokatalizatorów, leków, sensorów,
  - nanotechnologii np. projektowanie materiałów bioinspirowanych
  - i medycynie np. analizy genetyczne
- Nowe rewolucyjne technologie.

3.0 Å



[kcal/mol]



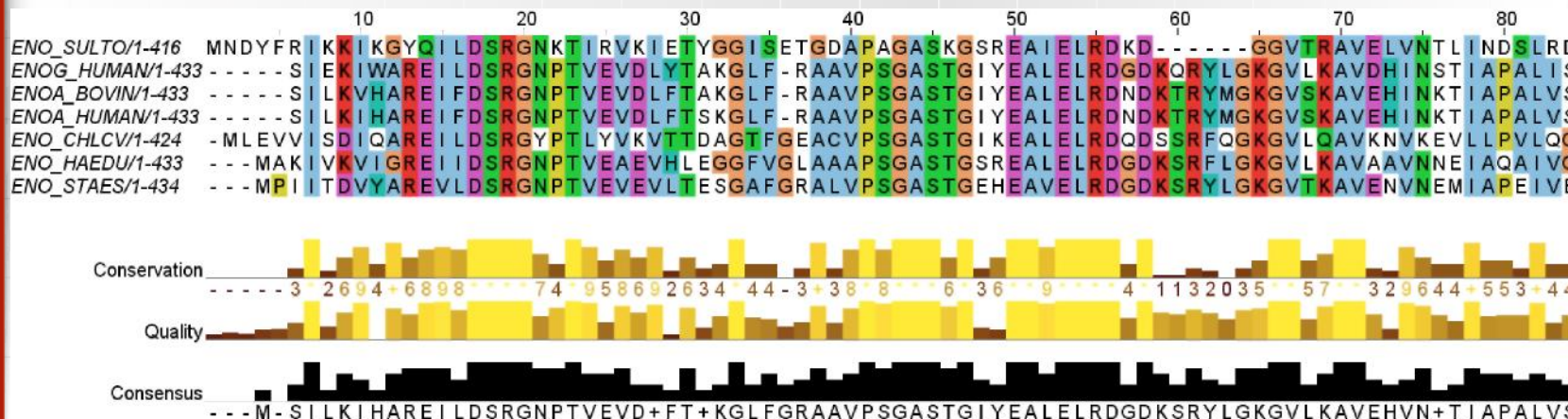
Modelowanie optymalnych oddziaływań



# Bioinformatics

Jedna z niewielu dziedzin nauki, w których Polska znajduje się w światowej czołówce, np.

- przewidywanie struktury białek na podstawie sekwencji,
- teoria oddziaływań międzycząsteczkowych.
- Możliwe łączenie pracy doświadczalnej z teoretyczną, elastyczny czas pracy.





# Bioinformatics

Studenci specjalności bioinformatics poznają:

- bioinformatykę
- modelowanie molekularne: chemia kwantowa, dynamika molekularna
- podstawy programowania
- zarządzania systemami operacyjnymi Unix/Linux
- metody numeryczne
- techniki multimedialne
- projektowanie leków
- analizę instrumentalną leków
- wyszukiwanie informacji w bazach literaturowych i strukturalnych.

Większe perspektywy zatrudnienia tam, gdzie wymagana jest większa niż przeciętna znajomość informatyki.

```
import math
class Vector:

    def __init__(self, x, y, z):
        self.x = x
        self.y = y
        self.z = z

    def __sub__(self, vec):
        dx = self.__x - vec.x
        dy = self.y - vec.y
        dz = self.z - vec.z
        return Vector(dx, dy, dz)

    def length(self):
        return math.sqrt(self.__x**2 + \
            self.y**2 + self.z**2)

    def __repr__(self):
        return "Vector('%f %f %f')% \
            (self.__x, self.y, self.z)

    @property
    def x(self): return self.__x

if name == ' main ':
```



Wrocław  
University  
of Science  
and Technology

# Bioinformatics - absolwenci

Mgr Monika Bajan – Fujitsu Poland, Kraków

Mgr Bartosz Blasiak – Korea University, Seul, Korea

Dr Edyta Dyguda-Kazimierowicz – W3/K1 PWr  
(PTCH, L'Oreal)

Dr Mikołaj Feliks - University of South California,  
Los Angeles, USA

Dr hab. Robert Góra – W3/Z PWr (FNP)

Dr Jakub Kaminski – Geneva University, Szwajcaria

Dr Anna Lenart – Celther, Poland

Dr Izabella Mossakowska – Liceum

Mgr Maciej Olchowik – KAUST, Saudi Arabia,  
HPC Administrator

Dr Julia Saloni – Jackson State University, USA

Mgr Rafał Szabla - Czech Academy of Sciences, Brno

Dr Borys Szefczyk – Nokia (FNP)

Dr Jarosław Szymczak - Universitaet Basel, Szwajcaria

Dr Urszula Uciechowska – University of Helsinki,  
Finlandia

Dr Małgorzata Wolcyrz – Holandia

Prof. Tomasz Cierpicki – University of Virginia, USA  
(PTCH, FNP)

Dr Marek Daszkiewicz – INTiBS PAN, Wrocław (FNP)  
Dr Paweł Dziekoński – KAUST, Arabia Saudyjska

Mgr Sebastian Gbur – Fujitsu Poland, Kraków

Dr Renata Grzywa – W3/Z13 Politechnika Wroclawska

Dr Karina Kornobis – University of Louisville,  
KY, USA, WCSS

Mgr Dorota Matelska - Inst. Biol.Mol. i Komórkowej, Warszawa

Mgr Mikołaj Mikołajczyk – Uniwersytet Medyczny, Wrocław

Dr Anna Rzepiela – Wageningen University, NL

Dr Magdalena Siwko – University of Groningen, NL

Dr Paweł Szarek – Kyoto Univ, Japonia, ICM Warszawa

Dr Bartłomiej Szyja – MunsterUniversity, Niemcy, W3

Dr Irena Tuszyńska – Inst. Biol.Mol.i Komórkowej, Warszawa

Dr Elżbieta Walczak – WCSS,  
Information Technology & Services, Wrocław

Dr Jolanta Żurek – University of Bristol, UK

PTCH - laureaci ogólnopolskiego konkursu PTCh na najlepszą pracę dyplomową FNP - laureaci ogólnopolskiego konkursu FNP na najlepszy doktorat (START)



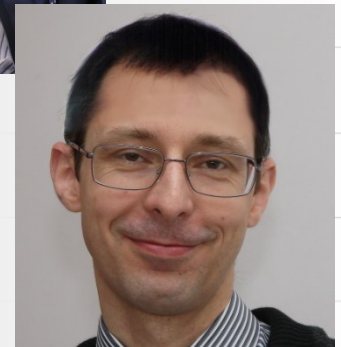




# Bioinformatics

## Kontakt:

- Prof. Tadeusz Andruniów  
[Tadeusz.Andruniow@pwr.edu.pl](mailto:Tadeusz.Andruniow@pwr.edu.pl)  
A2/404, tel. 71-320-3568
- Dr Edyta Dyguda-Kazimierowicz  
[Edyta.Dyguda@pwr.edu.pl](mailto:Edyta.Dyguda@pwr.edu.pl)  
A3/405, tel. 71-320-2675
- Dr Paweł Kędzierski  
[Pawel.Kedzierski@pwr.edu.pl](mailto:Pawel.Kedzierski@pwr.edu.pl)  
A3/301A, tel. 71-320-3200
- Prof. W. Andrzej Sokalski  
[Sokalski@pwr.edu.pl](mailto:Sokalski@pwr.edu.pl), A3/301, tel. 71-320-2457





# Bioinformatics

## Prace dyplomowe

- Badania obliczeniowe
- Elastyczny czas pracy, zdalna realizacja bez problemu

## Przykładowe tematy:

- Nieempiryczne metody przewidywania aktywności inhibicyjnej w układach receptor-ligand. Badanie aktywności katalitycznej w reakcjach katalizowanych przez enzymy.
- Automatyzacja wirtualnego screeningu dla efektywnej selekcji potencjalnych leków przeciwko nowym patogenom na przykładzie wirusa SARS-CoV-2.
- Zastosowanie metod przewidywania struktur białek ab initio dla białek o inherentnie nieuporządkowanej strukturze.
- Możliwości zastosowania znanych leków przeciwwirusowych przeciwko SARS-CoV-2 na podstawie modelowania inhibicji białka nsp14