

I. Magisterskie

1. Obliczenia teoretyczne metodą Car_Parinello przemian zachodzących w centrum aktywnym enzymu.

Pracę powinien wykonywać student fizyki komputerowej/informatyki stosowanej/lub fizyki medycznej obeznany z komputerami i trochę z mechaniką kwantową. W części teoretycznej opisana będzie metoda Car-Parinello realizacji obliczeń kwantowej dynamiki molekularnej. Po zapoznaniu się z gotowym programem CPMD wykonane będą obliczenia przyłączenia wody do wiązania potrójnego nitryli we wnętrzu ważnego enzymu biotechnologicznego. Praca stanowi część dużego projektu badawczego.

2. Dynamika tlenu w cytoglobinie – symulacje komputerowe

Celem pracy będzie przeprowadzenie obliczeń wielkoskalowych dyfuzji tlenu w białku hemowym. Stosowany będzie program NAMD i program VMD. Ważną częścią może być pisanie skryptów (TCL, PERL, inne) do analizy wyników symulacji MD. Będzie okazją do zapoznania się z technikami obróbki masowych ilości danych oraz algorytmami obliczeń dynamiki molekularnej. Cytoglobinę odkryto niedawno, jej funkcje nie jest poznana, badania mają charakter dość pionierski. Być może obliczenia będą rozszerzone na inne białka hemowe (np. H-NOX). Temat dobry dla stud. inf. stos., fizyki komp., medycznej, teoretycznej, ambitniejszych studentów MSN.

3. Sterowana dynamika molekularna – badania wariantów onkogenego białka gankyriny

W Zespole TBM wykonano już pierwsze na świecie symulacje dynamiki gankyriny – białka zaangażowanego w wiele procesów nowotworowych. Zbadano wstępnie mechanizm rozciągania tej nanosprężyny. Stosując wirtualny, komputerowy mikroskop sił atomowych trzeba będzie obliczyć trajektorie różnych mutantów gankyrin i zbadać ich właściwości mechaniczne.

Pracę może wykonać stud. fiz. med., inf. stos., MSN

II. Licencjackie

1. Motory molekularne

Celem pracy będzie opis najpowszechniejszych mechanizmów wykorzystywanych przez organizmy żywe do wykonywania pracy mechanicznej na poziomie molekularnym, np. ATPaz czy kinezyn.

Konieczna jest dobra znajomość języka angielskiego (lektury po ang.)

2. Podstawowe algorytmy bioinformatyki

W pracy opisane zostaną podstawowe algorytmy służące do przeszukiwania ogromnych baz danych białkowych i genomowych, np. BLAST. Wykonane będą proste testy porównawcze szybkości działania różnych algorytmów. Szczególna uwaga ma być poświęcona algorytmom wyszukiwania obszarów hydrofobowych białek.

III. Inżynierskie

1. System sprawdzania wiedzy „ForEva”.

Celem projektu będzie stworzenie profesjonalnej dokumentacji istniejącego systemu informatycznego o charakterze edukacyjnym. Przeprowadzone będą testy wydajności systemu. Trzeba napisać skrypty do ekstrakcji wyników testów. Zbadane będą możliwości migracji tego zasobu na inny system bazodanowy. Projekt przeznaczony dla dobrego studenta informatyki stosowanej, obeznanego nieco z WWW, Javą, bazami danych. Francuski mile widziany.