



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	MODELOWANIE MOLEKULARNE BIOMOLEKUŁ, PG_00045801						
Kierunek studiów	Biotechnologia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2022 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu		2022/2023			
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć		Grupa zajęć fakultatywnych			
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji		na uczelni			
Rok studiów	1	Język wykładowy		polski			
Semestr studiów	2	Liczba punktów ECTS		2.0			
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia		zaliczenie			
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Technologii Leków i Biochemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	prof. dr hab. inż. Maciej Bagiński					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	prof. dr hab. inż. Maciej Bagiński					
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	0.0	15.0	0.0	30
W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0							
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów	Udział w konsultacjach		Praca własna studenta		RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	30	6.0		14.0		50
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z wybranymi zagadnieniami z zakresu modelowania molekularnego, które mogą być przydatne przy wykonywaniu pracy dyplomowej w obszarze projektowania leków jak również mogą stanowić bazę dla specjalistycznych przedmiotów na III poziomie studiów. Cel strategiczny będzie realizowany poprzez przyswojenie sobie wiedzy teoretycznej jak też praktyczne wykonanie zadań w ramach laboratorium.						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu		Sposób weryfikacji i oceny efektu		
	[K7_W05] ma wiedzę o zależności między strukturą a właściwościami biomolekuł, oraz zasadach i zastosowaniach modelowania molekularnego biomolekuł		-posiada wiedzę na temat właściwości molekularnych prostych cząsteczek organicznych jak też biopolimerów -rozumie naturę oddziaływań pomiędzy biocząsteczkami i potrafi analizować takie oddziaływania		[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej		
	[K7_K02] ma świadomość ograniczeń, ale i nieustannego poszerzania się stanu wiedzy i techniki; rozumie potrzebę kształcenia i doksztalcania się przez całe życie		-potrafi znaleźć informację źródłową na temat badanego modelu -potrafi krytycznie zestawiać dane literaturowe z wynikami symulacji molekularnej		[SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce		
	[K7_U04] potrafi przewidywać potencjalne właściwości biomolekuł i związków biologicznie czynnych na podstawie znajomości ich struktury chemicznej i wykorzystać metody modelowania molekularnego biomolekuł		-umiejętność analizowania właściwości molekularnych układów biologicznych; - umiejętność wykorzystania wiedzy z zakresu modelowania molekularnego do budowania modeli badanych układów molekularnych in silico; -znajomość podstawowych metod i technik z zakresu modelowania molekularnego przydatnych w projektowaniu leków		[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji		

Treści przedmiotu	<ul style="list-style-type: none"> • - Wprowadzenie. Definicja modelowania molekularnego oraz jego geneza. • - Definicje i charakterystyka statycznych i dynamicznych właściwości molekularnych biomolekul (biopolimerów i małych cząsteczkowych związków organicznych). • - Definicje i charakterystyka oddziaływań molekularnych wewnątrz i międzycząsteczkowych. • - Zakresy stosowania modelowania molekularnego z podziałem na stopnie zawansowania metod. • - Pola siłowe – definicja i przykłady. • - Mechanika i dynamika molekularna. • - Omówienie oprogramowania do mechaniki i dynamiki molekularnej. • - Oddziaływania elektrostatyczne i modele solwatacyjne w modelowaniu molekularnym. • - Przykładowe zastosowania dynamiki molekularnej (biopolimery). • - Przykładowe zastosowania dynamiki molekularnej do symulacji błon biologicznych. • - Obliczenia energii swobodnej. • - Dokowanie molekularne. • - Modelowanie oddziaływań ligandów z celami molekularnymi. • - Komputerowe wspomaganie projektowania leków i innych cząstek o pożądanych właściwościach molekularnych. 		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Studenci muszą mieć ukończone kursy z zakresu chemii fizycznej, matematyki, biochemii i biofizyki.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	egzamin - wykład	60.0%	70.0%
	laboratorium - test	60.0%	30.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. CH.I. Brookes III, M. Karplus. B.M. Pettitt, Proteins, a theoretical perspective of dynamic, structure, and thermodynamics, Advances in Chemical Physics Volume LXXI, John Wiley & Sons, New York 1988 2. D.W. Heermann, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997 3. Ch. J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, theories and models, John Wiley & Sons, New York, 2002 4. D. Frenkel, B. Smit, Understanding molecular simulation, from algorithms to applications, Academic press, San Diego 2002 5. T. Schlick, Interdisciplinary Applied Mathematics, Vol. 21, Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide, Springer, 2010 (e-book). 6. J. Czub, Molekularne aspekty aktywności biologicznej amfoterycyny B i jej pochodnych o podwyższonej selektywności – badania z zastosowaniem metod chemii obliczeniowej. Praca doktorska, PG 2008. http://www.pg.gda.pl/~chemmbag/doktorat_Czub.pdf 	
	Uzupełniająca lista lektur	Lista publikacji naukowych przygotowana przez prowadzącego i podana na poszczególnych wykładach.	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>dynamika molekularna</p> <p>dokowanie molekularne</p> <p>projektowanie leków</p>		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		