



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	PRAKTYCZNE PODSTAWY MODELOWANIA MOLEKULARNEGO, PG_00039064						
Kierunek studiów	Biotechnologia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2022 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2021/2022		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnookadernicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnookadernicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Technologii Leków i Biochemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. inż. Marek Wojciechowski					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr hab. inż. Marek Wojciechowski					
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	30.0	0.0	0.0	45
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	45		10.0		20.0	75
Cel przedmiotu	Celem tego przedmiotu jest zaznajomienie studentów z teoretycznymi podstawami nowoczesnych metod modelowania, zarówno samych struktur cząsteczek chemicznych, jak i oddziaływań pomiędzy nimi. Zajęcia obejmują teoretyczne jak i praktyczne podstawy modelowania małych cząsteczek, makromolekuł oraz ich układów. Studenci poznają możliwości, wady i zalety najpopularniejszych, powszechnie dostępnych dla społeczności akademickiej, narzędzi do modelowania molekularnego. Uczą się analizy i czytelnej prezentacji uzyskiwanych podczas modelowania wyników.						
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		Student ma wiedzę o zależności między strukturą a właściwościami biomolekuł, oraz zasadach i zastosowaniach modelowania molekularnego zarówno małych cząsteczek, biopolimerów jak i oddziaływań między nimi		[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym		
	[K7_K02] ma świadomość ograniczeń, ale i nieustannego poszerzania się stanu wiedzy i techniki; rozumie potrzebę kształcenia i dokształcania się przez całe życie		Student ma świadomość ograniczeń stosowanych technik, ale i nieustannego poszerzania się stanu wiedzy i techniki; rozumie potrzebę ciągłego kształcenia i uzupełniania swojej wiedzy przez całe życie		[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		Student potrafi przewidywać właściwości biomolekuł i związków biologicznie czynnych na podstawie znajomości ich struktury chemicznej wykorzystując w optymalny sposób odpowiednie dla danego problemu metody modelowania molekularnego.		[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi			
Treści przedmiotu	Budowanie i wizualizacja cząsteczek chemicznych. Podstawowe sposoby zapisu cząsteczek. Powierzchnie molekularne. Empiryczny model oddziaływań. Mechanika molekularna. Pola siłowe. Analiza konformacyjna. Dynamika molekularna. Metoda Monte Carlo. Modele zredukowane. Analiza zespołów statystycznych. Dokowanie cząsteczek. Modelowanie struktur białek.						
Wymagania wstępne i dodatkowe	Nie ma wymagań						

Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Kolokwium z treści wykładów	60.0%	50.0%
	Praktyczne zaliczenie laboratorium	60.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Materiały dydaktyczne udostępniane przez prowadzącego	
	Uzupełniająca lista lektur	A. R. Leach Molecular Modelling Principles and Applications,	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ul style="list-style-type: none"> - pojęcie pola siłowego w modelowaniu molekularnym - stochastyczne metody analizy układów molekularnych - problem warunków brzegowych w modelowaniu molekularnym - najważniejsze etapy modelowania struktur białek 		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		