



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_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		
	[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 dokształcania się przez całe życie		-potrafi znaleźć informację źródłową na temat badanego modelu -potrafi krytycznie zestawić dane literaturowe z wynikami symulacji molekularnej			[SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce		

Treści przedmiotu	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Wprowadzenie. Definicja modelowania molekularnego oraz jego geneza.</li> <li>- Definicje i charakterystyka statycznych i dynamicznych właściwości molekularnych biomolekul (biopolimerów i małych cząsteczkowych związków organicznych).</li> <li>- Definicje i charakterystyka oddziaływań molekularnych wewnątrz i międzycząsteczkowych.</li> <li>- Zakresy stosowania modelowania molekularnego z podziałem na stopnie zaawansowania metod.</li> <li>- Pola siłowe – definicja i przykłady.</li> <li>- Mechanika i dynamika molekularna.</li> <li>- Omówienie oprogramowania do mechaniki i dynamiki molekularnej.</li> <li>- Oddziaływania elektrostatyczne i modele solwatacyjne w modelowaniu molekularnym.</li> <li>- Przykładowe zastosowania dynamiki molekularnej (biopolimery).</li> <li>- Przykładowe zastosowania dynamiki molekularnej do symulacji błon biologicznych.</li> <li>- Obliczenia energii swobodnej.</li> <li>- Dokowanie molekularne.</li> <li>- Modelowanie oddziaływań ligandów z celami molekularnymi.</li> <li>- Komputerowe wspomaganie projektowania leków i innych cząstek o pożądanych właściwościach molekularnych.</li> </ul>		
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"> <li>1. CH.I. Brookes III, M. Karplus. B.M. Pettitt, <b>Proteins, a theoretical perspective of dynamic, structure, and thermodynamics</b>, <i>Advances in Chemical Physics Volume LXXI</i>, John Wiley &amp; Sons, New York 1988</li> <li>2. D.W. Heermann, <b>Podstawy symulacji komputerowych w fizyce</b>, WNT, Warszawa 1997</li> <li>3. Ch. J. Cramer, <b>Essentials of Computational Chemistry, theories and models</b>, John Wiley &amp; Sons, New York, 2002</li> <li>4. D. Frenkel, B. Smit, <b>Understanding molecular simulation, from algorithms to applications</b>, Academic press, San Diego 2002</li> <li>5. T. Schlick, <b>Interdisciplinary Applied Mathematics, Vol. 21, Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide</b>, Springer, 2010 (e-book).</li> <li>6. J. Czub, <b>Molekularne aspekty aktywności biologicznej amfoterycyny B i jej pochodnych o podwyższonej selektywności – badania z zastosowaniem metod chemii obliczeniowej</b>. Praca doktorska, PG 2008. <a href="http://www.pg.gda.pl/~chemmbag/doktorat_Czub.pdf">http://www.pg.gda.pl/~chemmbag/doktorat_Czub.pdf</a></li> </ol>	
	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		