



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	PRAKTYCZNE PODSTAWY MODELOWANIA MOLEKULARNEGO, PG_00039064						
Kierunek studiów	Biotechnologia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2023 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2022/2023		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	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_W04] ma uporządkowaną wiedzę dotyczącą zastosowania narzędzi informatycznych w biotechnologii i modelowaniu molekularnym biomolekuł		Student zna podstawy teoretyczne najważniejszych technik obliczeniowych stosowanych w modelowaniu molekularnym i zna podstawowe aplikacje w których może je wykorzystać			[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym	
	[K7_K02] ma świadomość ograniczeń i konieczność nieustannego poszerzania się stanu wiedzy i techniki; rozumie potrzebę kształcenia i dokształcania się przez całe życie		Student ma świadomość szybkiego rozwoju tej dziedziny nauki i jest świadomy konieczności ciągłego uzupełniania i aktualizowania swojej wiedzy w obszarze modelowania molekularnego			[SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce	
	[K7_U06] umie stosować metody statystyczne, rozwiązania informatyczne, w szczególności metody bioinformatyczne do projektowania eksperymentów i technologii, analizy wyników eksperymentalnych i procesów technologicznych oraz rozwiązywania problemów z dziedziny biotechnologii, umie korzystać z biotechnologicznych baz danych		Student potrafi stosować metody statystyczne i informatyczne do planowania i analizy wyników eksperymentów obliczeniowych z zakresu modelowania molekularnego.			[SU1] Ocena realizacji zadania [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
	Praktyczne zaliczenie laboratorium	60.0%	50.0%
	Kolokwium z treści wykładów	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	Adresy na platformie eNauczanie: Praktyczne Podstawy Modelowania Molekularnego - 2023 - Moodle ID: 27463 <a href="https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=27463">https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=27463</a>	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ul style="list-style-type: none"> <li>- pojęcie pola siłowego w modelowaniu molekularnym</li> <li>- stochastyczne metody analizy układów molekularnych</li> <li>- problem warunków brzegowych w modelowaniu molekularnym</li> <li>- najważniejsze etapy modelowania struktur białek</li> </ul>		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		