



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Podstawy modelowania molekularnego, PG_00053379						
Kierunek studiów	Inżynieria biomedyczna, Inżynieria biomedyczna, Inżynieria biomedyczna						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2023 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2023/2024		
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 j. polski		
Semestr studiów	2	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		prof. dr hab. inż. Maciej Bagiński				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
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		3.0		27.0	75
Cel przedmiotu	Treści wykładu obejmują definicję i zastosowanie różnych metod modelowania molekularnego do badania właściwości molekularnych układów biologicznych w tym oddziaływań pomiędzy składnikami tych układów supramolekularnych; ponadto w ramach wykładu omawiane są zarysy komputerowego wspomaganie projektowania molekularnego cząsteczek o pożądanymi właściwościami; praktyczna realizacja w postaci projektu obejmować będzie zadanie symulacyjne dla małego układu biologicznego.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	<p>[K7_K01] jest gotów do tworzenia i rozwijania wzorów właściwego postępowania w środowisku pracy i życia, podejmowania inicjatyw, krytycznej oceny siebie oraz zespołów i organizacji, w których uczestniczy, przewodzenia grupie i ponoszenia odpowiedzialności za nią, odpowiedzialnego pełnienia ról zawodowych z uwzględnieniem zmieniających się potrzeb społecznych, w tym:</p> <ul style="list-style-type: none"> - rozwijania dorobku zawodu, - podtrzymywania etosu zawodu, - przestrzegania i rozwijania zasad etyki zawodowej oraz działania na rzecz przestrzegania tych zasad 	<p>Student poprzez wspólny projekt jest w stanie rozwijać wzorce właściwego postępowania i interakcje z innymi w środowisku zawodowym. Uczy się też odpowiedzialności i pełnienia ról zawodowych.</p>	<p>[SK3] Ocena umiejętności organizacji pracy [SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce</p>
	<p>[K7_U01] potrafi wykorzystywać posiadaną wiedzę matematyczną przy formułowaniu i rozwiązywaniu złożonych i nietypowych problemów związanych z kierunkiem studiów, poprzez:</p> <ul style="list-style-type: none"> - właściwy dobór informacji źródłowych oraz dokonywanie ich krytycznej analizy, syntezy oraz twórczej interpretacji i prezentacji tych informacji, - zastosowanie właściwych metod i narzędzi 	<p>Student potrafi w praktyce zastosować metody modelowania molekularnego w badaniu właściwości molekularnych i potrafi za pomocą metod matematycznych analizować te właściwości ilościowo.</p>	<p>[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU1] Ocena realizacji zadania</p>
	<p>[K7_W01] zna i rozumie w pogłębionym stopniu matematykę w zakresie niezbędnym do formułowania i rozwiązywania złożonych zagadnień związanych z kierunkiem studiów</p>	<p>Student zna i rozumie podstawowe równania obejmujące oddziaływania molekularne oraz równania opisujące pola siłowe w modelowaniu molekularnym, które służą do wykonywania obliczeń.</p>	<p>[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej</p>

Treści przedmiotu	<ol style="list-style-type: none"> 1. Wprowadzenie. Definicja modelowania molekularnego oraz jego geneza. 2. Definicje i charakterystyka statycznych i dynamicznych właściwości molekularnych biomolekuł (biopolimerów i małocząsteczkowych związków organicznych). 3. Definicje i charakterystyka oddziaływań molekularnych wewnątrz i międzycząsteczkowych. 4. Zakresy stosowania modelowania molekularnego z podziałem na stopnie zawansowania metod. 5. Pola siłowe definicja i przykłady. 6. Mechanika i dynamika molekularna. 7. Omówienie oprogramowania do mechaniki i dynamiki molekularnej. 8. Oddziaływania elektrostatyczne i modele solwatacyjne w modelowaniu molekularnym. 9. Przykładowe zastosowania dynamiki molekularnej (biopolimery). 10. Przykładowe zastosowania dynamiki molekularnej do symulacji błon biologicznych. 11. Obliczenia energii swobodnej. 12. Dokowanie molekularne. 13. Zwijanie białek. 14. Modelowanie homologiczne białek. 15. Modelowanie oddziaływań ligandów z celami molekularnymi. 16. Komputerowe wspomaganie projektowania leków i innych cząstek (w tym nowych materiałów) o pożądanym właściwościach molekularnych. 		
Wymagania wstępne i dodatkowe	matematyka, elementy fizyki i chemii		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	laboratorium - projekt	60.0%	30.0%
	wykład - test	60.0%	70.0%

Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<p>1. CH.I. Brookes III, M. Karplus. B.M. Pettitt, Proteins, a theoretical perspective of dynamics, structure, and thermodynamics, Advances in Chemical Physics Volume LXXI, John Wiley & Sons, New York 1988</p> <p>2. D.W. Heermann, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997</p> <p>3. Ch. J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, theories and models, John Wiley & Sons, New York, 2002</p> <p>4. D. Frenkel, B. Smit, Understanding molecular simulation, from algorithms to applications, Academic press, San Diego 2002</p> <p>5.T. Schlick, Interdisciplinary Applied Mathematics, Vol. 21, Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide, Springer, 2010 (e-book).</p> <p>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.</p>
	Uzupełniająca lista lektur	Publikacje jako obrazowanie poszczególnych wykładów.
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>opis pól siłowych</p> <p>mechanika molekularna</p> <p>dynamika molekularna</p> <p>molekularny potencjał elektrostatyczny</p>	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	