



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie molekularne, PG_00038906						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2023 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu	2023/2024				
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	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	5.0	25.0	75		
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z wybranymi zagadnieniami z zakresu modelowania molekularnego, które mogą być przydatne przy wykonywaniu pracy dyplomowej 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 projektu. Przedstawiane treści kształcenia w zakresie tego przedmiotu zachęcają do samodzielnego poszerzania wiedzy z wykorzystaniem zasobów elektronicznych oraz wskazanej literatury podstawowej i uzupełniającej.						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu			Sposób weryfikacji i oceny efektu		
	[K7_W02] ma uporządkowaną, poszerzoną wiedzę związaną ze współczesną chemią, obejmującą właściwości oraz otrzymywanie związków chemicznych, niezbędne do dokonywania obliczeń i rozwiązywania problemów technicznych, w tym obejmujące zależność struktury związku i jego reaktywność	-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_U01] potrafi pozyskiwać informacje z literatury, baz danych i innych źródeł, również w języku angielskim, potrafi integrować uzyskane informacje, dokonywać ich interpretacji i krytycznej oceny, a także wyciągać wnioski oraz formułować i uzasadniać opinie,	-potrafi znaleźć informację źródłową na temat badanego modelu -potrafi krytycznie zestawić dane literaturowe z wynikami symulacji molekularnej			[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji		
	[K7_W05] ma poszerzoną i pogłębioną wiedzę w zakresie fizyki, obejmującą zjawiska z zakresu mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego i fizyki jądrowej, niezbędną do przewidzenia przebiegu zjawisk fizycznych i do rozwiązania rozmaitych problemów technicznych w tym pracy z taki urządzeniami jak mikroskopy elektronowe.	-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		

Treści przedmiotu	<p>Wstęp do przedmiotu i omówienie jego zakresu          Układy biologiczne i molekularne jako przedmiot modelowania molekularnego          Właściwości molekularne badane in silico          Budowa modeli molekularnych          Przegląd metod modelowania molekularnego          Przegląd oprogramowania i zasobów Internetu w zakresie modelowania molekularnego          Podstawy mechaniki i dynamiki molekularnej          Pola siłowe w mechanice i dynamice molekularnej          Analiza konformacyjna układów molekularnych          Właściwości elektrostatyczne układów molekularnych          Analiza oddziaływań międzycząsteczkowych          Podstawy projektowania molekularnego wspomaganego komputerowo          Dokowanie molekularne          Projektowanie de novo ligandów          Test sprawdzający zdobytą na wykładzie wiedzę</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	<p>1. Chemia ogólna</p> <p>1.1. Wiązania chemiczne, oddziaływania międzycząsteczkowe</p> <p>1.2. Właściwości wody, roztwory wodne</p> <p>2. Chemia organiczna i fizyczna</p> <p>2.1. Związki organiczne</p> <p>2.2. Termodynamika</p> <p>3. Biofizyka</p> <p>3.1. Układy molekularne</p> <p>3.2. Właściwości molekularne biopolimerów</p> <p>3.3. Elektrostatyka</p> <p>4. Biochemia</p> <p>4.1. Budowa biopolimerów (DNA, białka)</p>		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	wykład (zaliczenie)	60.0%	70.0%
	projekt	60.0%	30.0%

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, <i>Advances in Chemical Physics Volume LXXI</i>, John Wiley &amp; Sons, New York 1988</p> <p>2. D.W. Heermann, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997</p> <p>3. Ch. J. Cramer, <i>Essentials of Computational Chemistry, theories and models</i>, John Wiley &amp; Sons, New York, 2002</p> <p>4. D. Frenkel, B. Smit, <i>Understanding molecular simulation, from algorithms to applications</i>, Academic press, San Diego 2002</p> <p>5. T. Schlick, <i>Interdisciplinary Applied Mathematics, Vol. 21, Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide</i>, 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. <a href="http://www.pg.gda.pl/~chemmbag/doktorat_Czub.pdf">http://www.pg.gda.pl/~chemmbag/doktorat_Czub.pdf</a></p>
	Uzupełniająca lista lektur	Szereg publikacji naukowych i materiałów dydaktycznych przygotowanych przez prowadzącego.
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>dynamika molekularna</p> <p>mechanika molekularna</p> <p>oddziaływania międzycząsteczkowe</p> <p>dokowanie molekularne</p>	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	