



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	MODELOWANIE MOLEKULARNE BIOMOLEKUŁ, PG_00058279						
Kierunek studiów	Biotechnologia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2024/2025		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			polski polski - niektóre materiały w j. angielskim, oprogramowanie w j. angielskim		
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 dr inż. Mateusz Kogut					
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		2.0		18.0	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_U07] potrafi uwzględnić problemy i regulacje bioetyczne w planowaniu badań i projektowaniu produktów i procesów biotechnologicznych		Student rozumie podstawy projektowania leków w tym problemy etyczne związane z projektowaniem leków.		[SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji		
	[K7_K02] ma świadomość ograniczeń i konieczność nieustannego poszerzania się stanu wiedzy i techniki; rozumie potrzebę kształcenia i dokształcania się przez całe życie		Student rozumie i ma świadomość ograniczenie metod modelowania molekularnego i konieczności kształcenia oraz doskonalenia warsztatu badawczego w tym zakresie.		[SK2] Ocena postępów pracy [SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce		
	[K7_W04] ma uporządkowaną wiedzę dotyczącą zastosowania narzędzi informatycznych w biotechnologii i modelowaniu molekularnym biomolekuł		Student posiada wiedzę o metodach modelowania molekularnego typu dynamika i mechanika molekularna.		[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym [SW1] Ocena wiedzy faktograficznej		
	[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 umie korzystać z metod modelowania molekularnego typu dynamika molekularna w celu poznania właściwości molekularnych biocząsteczek.		[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU1] Ocena realizacji zadania		

Treści przedmiotu	<ul style="list-style-type: none"> - Wprowadzenie. Definicja modelowania molekularnego oraz jego geneza. - Definicje i charakterystyka statycznych i dynamicznych właściwości molekularnych biomolekuł (biopolimerów i małych cząsteczkowych związków organicznych). - Definicje i charakterystyka oddziaływań molekularnych wewnątrz i międzycząsteczkowych. - Zakresy stosowania modelowania molekularnego z podziałem na stopnie zawansowania metod. - Pola siłowe definicja i przykłady. - Mechanika i dynamika molekularna. - Omówienie oprogramowania do mechaniki i dynamiki molekularnej. - Oddziaływania elektrostatyczne i modele solwatacyjne w modelowaniu molekularnym. - Przykładowe zastosowania dynamiki molekularnej (biopolimery). - Przykładowe zastosowania dynamiki molekularnej do symulacji błon biologicznych. - Obliczenia energii swobodnej. - Dokowanie molekularne. - Modelowanie oddziaływań ligandów z celami molekularnymi. - Komputerowe wspomaganie projektowania leków i innych cząstek o pożądanych właściwościach molekularnych. - metody sztucznej inteligencji w projektowaniu leków 		
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
	laboratorium - practical test	60.0%	30.0%
	egzamin - wykład	60.0%	70.0%
Zalecana lista lektur	<p>Podstawowa lista lektur</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. CH.I. Brookes III, M. Karplus. B.M. Pettitt, Proteins, a theoretical perspective of dynamic, structure, and thermodynamics, Advances in Chemical Physics Volume LXXI, John Wiley & Sons, New York 1988 2. D.W. Heermann, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997 3. Ch. J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, theories and models, John Wiley & Sons, New York, 2002 4. D. Frenkel, B. Smit, Understanding molecular simulation, from algorithms to applications, Academic press, San Diego 2002 5. T. Schlick, Interdisciplinary Applied Mathematics, Vol. 21, Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide, Springer, 2010 (e-book). 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. 7. Simone Brogi, Teodorico Castro Ramalho, José L. Medina-Franco, Kamil Kuca and Marian Valko, silico methods in drug design and discovery. <i>Frontiers in Chemistry</i>, 2020 (DOI: 10.3389/978-2-88966-057-5). 8. Marco Tutone and Anna Maria Almerico, <i>Computational Approaches Drug Discovery and Design in Medicinal Chemistry and Bioinformatics</i>, MDPI 2021 (ISBN: 978-3-0365-2779-6; 978-3-0365-2778-9). 9. Rebecca C. Wade and Outi M. H. Salo-Ahen, <i>Molecular Modeling in Drug Design</i>, MDPI 2019 (ISBN: 978-3-03897-615-8) 10. Jerzy Leszczynski, <i>Handbook of Computational Chemistry</i>, Springer 2012 (ISBN: 978-94-007-0711-5; 978-94-007-0712-2; 978-94-007-0710-8) 5. Giovanni Ciccotti, Mauro Ferrario and Christof Schuette, <i>Molecular Dynamics Simulation</i>, MDPI 2014 (ISBN: 978-3-906980-65-2; 978-3-906980-66-9). 6. Gerhard Klebe, <i>Drug design</i>, Springer 2013 (DOI 10.1007/978-3-642-17907-5). 		
	Uzupełniająca lista lektur	Lista publikacji naukowych przygotowana przez prowadzącego i podana na poszczególnych wykładach.	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>dynamika molekularna</p> <p>mechanika molekularna</p> <p>projektowanie leków</p> <p>dokowanie molekularne</p> <p>hydratacja in molecular modeling</p>		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.