



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 | <p>Studenci muszą mieć ukończone kursy z zakresu chemii fizycznej, matematyki, biochemii i biofizyki.</p> | | | | | | | | | | | |
| Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się | <table border="1"> <thead> <tr> <th>Sposób oceniania (składowe)</th> <th>Próg zaliczeniowy</th> <th>Składowa oceny końcowej</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>laboratorium - practical test</td> <td>60.0%</td> <td>30.0%</td> </tr> <tr> <td>egzamin - wykład</td> <td>60.0%</td> <td>70.0%</td> </tr> </tbody> </table> | Sposób oceniania (składowe) | Próg zaliczeniowy | Składowa oceny końcowej | laboratorium - practical test | 60.0% | 30.0% | egzamin - wykład | 60.0% | 70.0% | | |
| 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> <p>Uzupełniająca lista lektur</p> <p>Adresy eZasobów</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). <p>Lista publikacji naukowych przygotowana przez prowadzącego i podana na poszczególnych wykładach.</p> <p>Adresy na platformie eNauczanie:</p> | | | | | | | | | | |
| 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 | <p>Nie dotyczy</p> | | | | | | | | | | | |

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.