

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	MODELOWANIE MOLEKULARNE BIOMOLEKUŁ, PG_00063476						
Kierunek studiów	Biotechnologia						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć specjalnościowych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	2		Język wykładowy		polski j. polski		
Semestr studiów	3		Liczba punktów ECTS		2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> 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				
Formy zajęć	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_U04] przewiduje oddziaływanie biomolekuł i związków biologicznie czynnych na organizmy żywe oraz przebieg procesów z ich udziałem w oparciu o wiedzę w zakresie biologii, biotechnologii i dziedzin pokrewnych oraz komputerowe metody analizy danych, modelowania i symulacji		- rozumie strukturę molekularną biomolekuł - rozumie oddziaływania pomiędzy cząsteczkami biologicznymi - rozumie szlaki przyczynowo-skutkowe na poziomie molekularnym		[SU3] Assessment of ability to use knowledge gained from the subject [SU2] Assessment of ability to analyse information		
	[K7_W04] dobiera metody analizy danych, w tym bioinformatyczne, statystyczne i modelowania molekularnego, przydatne do rozwiązywania problemów technologicznych i naukowych w biotechnologii i dziedzinach pokrewnych		- posiada wiedzę o podstawowych metodach molekularnych - umie korzystać z niektórych metod modelowania molekularnego w praktyce - potrafi analizować wyniki modelowania molekularnego dla biocząsteczek		[SW3] Assessment of knowledge contained in written work and projects [SW1] Assessment of factual knowledge		

Treści przedmiotu	- 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 zaawansowania 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 - Poznanie oprogramowania do modelowania molekularnego - Wykonanie szeregu prostych symulacji celem nauki w praktyce jakie może mieć zastosowanie modelowanie molekularne - Analiza otrzymywanych wyników w ramach prostych symulacji - Wykonanie zadanej symulacji projektowej na zaliczenie		
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
	egzamin - wykład	60.0%	70.0%
	laboratorium - practical test	60.0%	30.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	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 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 in silico methods in drug design and discovery. Frontiers in Chemistry, 2020 (DOI: 10.3389/fchem.2020.58966-057-5). 8. Marco Tutone and Anna Maria Almerico, Computational Approaches Drug Discovery and Design in Medicinal Chemistry and Bioinformatics, MDPI 2021 (ISBN: 978-3-0365-2779-6; 978-3-0365-2778-9). 9. Rebecca C. Wade and Outi M. H. Salo-Ahen, Molecular Modeling in Drug Design, MDPI 2019 (ISBN: 978-3-03897-615-8) 10. Jerzy Leszczynski, Handbook of Computational Chemistry, 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, Molecular Dynamics Simulation, MDPI 2014 (ISBN: 978-3-906980-65-2; 978-3-906980-66-9). 6. Gerhard Klebe, Drug design, 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		

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	dynamika molekularna mechanika molekularna projektowanie leków dokowanie molekularne hydratation in molecular modeling
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.