

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie molekularne, PG_00066121						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2025 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2024/2025		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć specjalnościowych		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	1		Język wykładowy		polski		
Semestr studiów	1		Liczba punktów ECTS		3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		egzamin		
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 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						
	Adresy kursu na platformie eNauczanie: Moodle ID: 44582 Modelowanie molekularne https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=44582						
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 laboratoryjnego. 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_W03] rozpoznaje i opisuje zjawiska z zakresu fizyki, obejmującą elementy mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego i fizyki jądrowej, niezbędne do przewidzenia przebiegu zjawisk fizycznych i do rozwiązywania problemów technicznych		Student zna i rozumie podstawowe równania fizyki obejmujące oddziaływania molekularne oraz równania opisujące pola siłowe w modelowaniu molekularnym, które służą do wykonywania obliczeń.			[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej	
	[K7_U04] opracowuje i przekazuje informacje techniczne w postaci dokumentów tekstowych, arkuszy kalkulacyjnych, wykresów, schematów technologicznych oraz prezentacji multimedialnych, oraz przygotowuje wystąpienie wraz z prezentacją multimedialną		Student potrafi w praktyce zastosować metody modelowania molekularnego w badaniu właściwości molekularnych i potrafi za pomocą metod matematycznych analizować te właściwości ilościowo.			[SU1] Ocena realizacji zadania [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania	
	[K7_W01] rozpoznaje problemy współczesnej chemii, obejmujące właściwości oraz otrzymywanie związków chemicznych, niezbędne do dokonywania obliczeń, w tym obejmujące zależność struktury związku i jego reaktywność		Student umie korzystać z metod modelowania molekularnego typu dynamika molekularna w celu poznania właściwości molekularnych biocząsteczek. Student rozumie podstawy projektowania związków chemicznych o pożądanach właściwościach.			[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej	

Treści przedmiotu	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		
Wymagania wstępne i dodatkowe	1. Chemia ogólna 1.1. Wiązania chemiczne, oddziaływania międzycząsteczkowe 1.2. Właściwości wody, roztwory wodne 2. Chemia organiczna i fizyczna 2.1. Związki organiczne 2.2. Termodynamika 3. Biofizyka 3.1. Układy molekularne 3.2. Właściwości molekularne biopolimerów 3.3. Elektrostatyka 4. Biochemia 4.1. Budowa biopolimerów (DNA, białka)		
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	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. http://www.pg.gda.pl/~chemmbag/doktorat_Czub.pdf
	Uzupełniająca lista lektur	Szereg publikacji naukowych i materiałów dydaktycznych przygotowanych przez prowadzącego.
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Test zawiera 20 pytań otwartych przykładowo zagadnienia: dynamika molekularna mechanika molekularna oddziaływania międzycząsteczkowe dokowanie molekularne	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.