

WYDZIAŁ CHEMICZNY					
KARTA PRZEDMIOTU					
Nazwa przedmiotu w języku polskim		Modelowanie molekularne			
Nazwa przedmiotu w języku angielskim		Molecular modeling			
Kierunek studiów (jeśli dotyczy):		Chemia			
Specjalność (jeśli dotyczy):		Chemia związków organicznych i polimerów			
Poziom i forma studiów:		II stopień, stacjonarna			
Rodzaj przedmiotu:		obowiązkowy			
Kod przedmiotu		CHC023031			
Grupa kursów		NIE			
	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)			30		
Liczba godzin całkowitego nakładu pracy studenta (CNPS)			60		
Forma zaliczenia			zaliczenie na ocenę		
Dla grupy kursów zaznaczyć kurs końcowy (X)					
Liczba punktów ECTS			2		
w tym liczba punktów odpowiadająca zajęciom o charakterze praktycznym (P)			2		
w tym liczba punktów ECTS odpowiadająca zajęciom wymagającym bezpośredniego kontaktu (BK)			1		
WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I KOMPETENCJI SPOŁECZNYCH					
1. Podstawy znajomości budowy cząsteczek i hybrydyzacji 2. Podstawy geometrii analitycznej 3. Podstawowa znajomość chemii organicznej 4. Podstawowe umiejętności korzystania z komputera					
CELE PRZEDMIOTU					
C1 Nauczanie konstrukcji trójwymiarowych modeli cząsteczek C2 Nauczanie zastosowań meto chemii kwantowej C3 Nauczanie podstawowych koncepcji teorii oddziaływań międzycząsteczkowych C4 Zapoznanie z technikami modelowania agregatów cząsteczek C5 Zapoznanie z podstawami modelowania reakcji chemicznych					
PRZEDMIOTOWE EFEKTY UCZENIA SIĘ					
Z zakresu umiejętności: PEK_U01 – umiejętność konstruowania trójwymiarowych modeli cząsteczek na podstawie rozpoznanego typu hybrydyzacji PEK_U02 – umiejętność obliczeniowego przewidywania struktury i właściwości cząsteczek PEK_U03 – umiejętność przewidywania możliwych struktur agregatów cząsteczkowych PEK_U04 – umiejętność analizy oddziaływań w układach białko-ligand PEK_U05 – umiejętność modelowania właściwości dynamicznych agregatów cząsteczkowych Z zakresu kompetencji społecznych: PEK_K01 – umiejętność zrozumienia, krytycznej oceny i komunikacji informacji ze źródeł naukowych związanej z metodami modelowania układów biocząsteczek i ich właściwości.					
TREŚCI PROGRAMOWE					
Forma zajęć - laboratorium					Liczba godzin
La1	Wprowadzenie i organizacja zajęć. Edycja struktur cząsteczek.				2

La2	Przygotowanie obliczeń dynamiki molekularnej	2
La3	Przygotowanie obliczeń dynamiki molekularnej	2
La4	Analiza wyników i trajektorii dynamiki molekularnej	2
La5	Indywidualne zadanie obliczeniowe 1	2
La6	Parametryzacja pola siłowego dla cząsteczek organicznych: topologia, typy atomów, parametry niewiążące	2
La7	Parametryzacja pola siłowego dla cząsteczek organicznych: optymalizacja ładunków atomowych	2
La8	Parametryzacja pola siłowego dla cząsteczek organicznych: parametry wiążące	2
La9	Indywidualne zadanie obliczeniowe 2	2
La10	Dokowanie receptor-ligand oraz wirtualny screening.	2
La11	Kwantowe obliczenia energii oddziaływań	2
La12	Indywidualne zadanie obliczeniowe 4	2
La13	Wprowadzenie do modelowania metodami hybrydowymi QM/MM	2
La14	Modelowanie profilu energetycznego reakcji z użyciem metod QM/MM	2
La15	Indywidualne zadanie obliczeniowe 4	2
	Suma godzin	30

STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

- N1. Rozwiązywanie problemów
N2. Wykorzystanie specjalistycznego oprogramowania
N3. Przygotowanie raportów z wyników i analizy obliczeń

OCENA OSIĄGNIĘCIA PRZEDMIOTOWYCH EFEKTÓW UCZENIA SIĘ

Oceny (F – formująca (w trakcie semestru), P – podsumowująca (na koniec semestru))	Numer efektu uczenia się	Sposób oceny osiągnięcia efektu uczenia się
F_Lab1	PEK_W04, PEK_U05	Indywidualne zadanie obliczeniowe 1
F_Lab2	PEK_W01, PEK_W04, PEK_U01, PEK_U04	Indywidualne zadanie obliczeniowe 2
F_Lab3	PEK_W04, PEK_U03, PEK_U04	Indywidualne zadanie obliczeniowe 3
F_Lab4	PEK_W04, PEK_U02	Indywidualne zadanie obliczeniowe 4
C_Lab	PEK_U01, PEK_U02, PEK_U03, PEK_U04, PEK_U05, PEK_W01, PEK_W04	F_Lab1+F_Lab2+F_Lab3+F_Lab4 Punkty Ocena 14-16 3,0 17-19 3,5 20-22 4,0 23-25 4,5 26-28 5,0

LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA

LITERATURA PODSTAWOWA:

- [1] L. Piel, Quantum Chemistry Ideas, Elsevier, 2010
[2] A.R. Leach, Molecular Modeling: Principles and Applications, (2-nd Ed), Prentice Hall, 2001
[3] H.D. Hotje, Molecular modeling. Basic principles and applications, (3-rd Ed), Wiley, 2008
[4] T. Schlick, Molecular modeling and simulation, Springer, 2002.

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:

- [1] F. Jensen, Introduction to computational chemistry, Wiley, 2006 (2-nd Ed)
[2] J.M. Goodman, Chemical Applications of Molecular Modeling, RSC, 1999.
[3] J.P. Doucet, J. Weber, Computer-Aided Molecular Design, 1996, Academic Press, 1996
[4] G.H. Grant, W.G. Richards, Computational chemistry, Oxford Sci. Publ., 1995

OPIEKUN PRZEDMIOTU (IMIE, NAZWISKO, ADRES E-MAIL)

Paweł Kędzierski, Pawel.Kedzierski@pwr.edu.pl