

WYDZIAŁ CHEMICZNY					
KARTA PRZEDMIOTU					
Nazwa przedmiotu w języku polskim			Modelowanie biomolekuł		
Nazwa przedmiotu w języku angielskim			Modeling biomolecules		
Kierunek studiów (jeśli dotyczy):			Biotechnologia		
Specjalność (jeśli dotyczy):			Biotechnologia farmaceutyczna		
Poziom i forma studiów:			II stopień , stacjonarna		
Rodzaj przedmiotu:			obowiązkowy		
Kod przedmiotu			BTC023029		
Grupa kursów			NIE		
	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)	15		30		15
Liczba godzin całkowitego nakładu pracy studenta (CNPS)	30		60		30
Forma zaliczenia	zaliczenie na ocenę		zaliczenie na ocenę		zaliczenie na ocenę
Dla grupy kursów zaznaczyć kurs końcowy (X)					
Liczba punktów ECTS	2		2		1
w tym liczba punktów odpowiadająca zajęciom o charakterze praktycznym (P)			2		1
w tym liczba punktów ECTS odpowiadająca zajęciom wymagającym bezpośredniego kontaktu (BK)	0,5		1		0,5
WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I KOMPETENCJI SPOŁECZNYCH <ol style="list-style-type: none"> 1. Znajomość teorii budowy atomu i cząsteczki 2. Znajomość analizy matematycznej 3. Znajomość technologii informatycznych 4. Znajomość chemii organicznej 					
CELE PRZEDMIOTU <p>C1 Zapoznanie studentów z konstrukcją trójwymiarowych modeli molekularnych</p> <p>C2 Zapoznanie studentów z metodami kwantowo-chemicznymi</p> <p>C3 Zapoznanie studentów z teorią oddziaływań międzycząsteczkowych</p> <p>C4 Zapoznanie studentów z technikami modelowania agregatów biocząsteczek</p> <p>C5 Zapoznanie studentów z technikami modelowania reakcji chemicznych i biokatalizatorów</p>					

PRZEDMIOTOWE EFEKTY UCZENIA SIĘ

Z zakresu wiedzy:

PEK_W01 zna matematyczne podstawy konstrukcji trójwymiarowych modeli molekularnych oraz ich transformacji

PEK_W02 ma podstawowe wiadomości o metodach obliczeniowych stosowanych w modelowaniu molekularnym i zna ich zakres stosowalności

PEK_W03 zna charakterystyki głównych składowych energii oddziaływań międzycząsteczkowych

PEK_W04 zna techniki projektowania ligandów i biokatalizatorów

Z zakresu umiejętności:

PEK_U01 potrafi skonstruować trójwymiarowy model cząsteczki w oparciu o przyjęte typy hybrydyzacji

PEK_U02 umie przewidzieć drogą obliczeń strukturę i właściwości cząsteczki

PEK_U03 potrafi zaproponować możliwe struktury agregatów molekularnych

PEK_U04 potrafi analizować oddziaływania ligandów z białkami

PEK_U05 potrafi modelować dynamiczne właściwości agregatów molekularnych

Z zakresu kompetencji społecznych:

PEK_K01 uznaje znaczenie wiedzy i umiejętności w rozwiązywaniu problemów praktycznych

PEK_K02 podejmuje krytyczną ocenę możliwości zastosowania wybranej metodologii do rozwiązania określonego problemu

PEK_K03 potrafi współdziałać w grupie i uznaje znaczenie umiejętnego przekazywania treści naukowych

TREŚCI PROGRAMOWE

Forma zajęć - wykład		Liczba godzin
Wy1	Pojęcia podstawowe. Interdyscyplinarny charakter modelowania molekularnego. Typowe zagadnienia rozwiązywane metodami modelowania molekularnego. Źródła informacji strukturalnych. Algorytm konstrukcji trójwymiarowych modeli molekularnych. Hybrydyzacja. Przykłady konstrukcji modeli molekularnych. Podstawowe transformacje współrzędnych. Elementarne pojęcia grafiki molekularnej. Techniki wizualizacji cząsteczek chemicznych. Przegląd źródeł literaturowych.	2
Wy2	Repetitorium podstawowych pojęć mechaniki kwantowej. Przegląd metod obliczeniowych chemii kwantowej. Metoda HMO LCAO MO. Teoretyczne przewidywanie wielkości fizycznych. Przewidywanie struktury izolowanych cząsteczek chemicznych.	2
Wy3	Ćwiczenia i test z zakresu konstrukcji modeli molekularnych	2
Wy4	Podstawowe pojęcia teorii oddziaływań międzycząsteczkowych. Rachunek zaburzeń. Charakterystyki głównych składowych energii oddziaływań międzycząsteczkowych.	2
Wy5	Wiązania wodorowe. Rozkład ładunku w cząsteczkach chemicznych i modele elektrostatyczne. Pola siłowe. Przewidywanie struktury agregatów molekularnych.	2
Wy6	Ćwiczenia i test z zakresu przewidywania właściwości cząsteczek chemicznych oraz przewidywania struktury agregatów molekularnych.	2
Wy7	Modelowanie oddziaływań w receptorach i centrach aktywnych enzymów. Projektowanie leków. Elementy dynamiki molekularnej. Modelowanie struktury białek przez homologię.	2
Wy8	Analiza aktywności katalitycznej enzymów i projektowanie biokatalizatorów.	1
	Suma godzin	15
Forma zajęć - laboratorium		Liczba godzin
La1	Wprowadzenie do tematyki zajęć i organizacji pracy w laboratorium komputerowym.	2
La2	Sposoby reprezentowania struktury cząsteczki.	2
La3	Opis struktury cząsteczki za pomocą macierzy Z - wprowadzenie do programu Molden.	2

La4	Optymalizacja geometrii i obliczenie podstawowych właściwości cząsteczek metodami kwantowo-chemicznymi.	2
La5	Analiza i wizualizacja wyników obliczeń kwantowo-chemicznych. Analiza częstości drgań normalnych.	2
La6	Oddziaływania niekowalencyjne - struktura kompleksu i obliczenia energii oddziaływania.	2
La7	Zadanie obliczeniowe nr 1.	2
La8	Zadanie obliczeniowe nr 2.	2
La9	Wizualizacja i analiza struktury biomolekuł i oddziaływań białko-ligand.	2
La10	Zadanie obliczeniowe nr 3.	2
La11	Wprowadzenie do obliczeń opartych o pola siłowe. Przygotowanie symulacji dynamiki molekularnej.	2
La12	Analiza trajektorii dynamiki molekularnej.	2
La13	Zadanie obliczeniowe nr 4.	4
La14	Dokowanie molekularne.	2
	Suma godzin	30
Forma zajęć - seminarium		Liczba godzin
Se1	Referaty uczestników dotyczące wybranych technik modelowania molekularnego biomolekuł	2
Se2	Referaty uczestników dotyczące wybranych technik modelowania molekularnego biomolekuł	2
Se3	Referaty uczestników dotyczące wybranych technik modelowania molekularnego biomolekuł	2
Se4	Referaty uczestników dotyczące wybranych technik modelowania molekularnego biomolekuł	2
Se5	Referaty uczestników dotyczące wybranych technik modelowania molekularnego biomolekuł	2
Se6	Referaty uczestników dotyczące wybranych technik modelowania molekularnego biomolekuł	2
Se7	Referaty uczestników dotyczące wybranych technik modelowania molekularnego biomolekuł	2
Se8	Referaty uczestników dotyczące wybranych technik modelowania molekularnego biomolekuł	1
	Suma godzin	15
STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE		
N1. Wykład z prezentacją multimedialną N2. Rozwiązywanie zadań N3. Wykorzystywanie oprogramowania do rozwiązywania zadań N4. Referat z prezentacją multimedialną N5. Przygotowanie sprawozdania		
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
F1 (wykład)	PEK_W01, PEK_W02	Test cząstkowy I
F2 (wykład)	PEK_W03, PEK_W04	Test cząstkowy II
P1 (wykład) = F1 + F2		
F3 (seminarium)	PEK_K01, PEK_K02, PEK_K03	Referat z prezentacją multimedialną
P2 (seminarium)		

F4 (laboratorium)	PEK_U01 PEK_U02	Sprawozdanie z wyników projektu obliczeniowego I
F5 (laboratorium)	PEK_U02 PEK_U03	Sprawozdanie z wyników projektu obliczeniowego II
F6 (laboratorium)	PEK_U04	Sprawozdanie z wyników projektu obliczeniowego III
F7 (laboratorium)	PEK_U05	Sprawozdanie z wyników projektu obliczeniowego IV
P3 (laboratorium) = F4 + F5 + F6 + F7		
LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA		
<p><u>LITERATURA PODSTAWOWA:</u></p> <p>[1] K. Pigoń, Z. Ruziewicz, Chemia Fizyczna T.2 Fizykochemia molekularna, PWN, 2011</p> <p>[2] L. Piela, Idee chemii kwantowej, 2 wydanie, PWN 2012</p> <p>[3] A.R. Leach, Molecular Modeling: Principles and Applications, 2 wydanie, Prentice Hall, 2001</p> <p>[4] H.D. Hotje, Molecular modeling. Basic principles and applications, 3 wydanie, Wiley, 2008</p> <p>[5] T. Schlick, Molecular modeling and simulation, Springer, 2002</p> <p><u>LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:</u></p> <p>[1] R.F. Nalewajski: <i>Podstawy i metody chemii kwantowej: wykłady</i>. Warszawa: Wydawnictwo Naukowe PWN, 2001</p> <p>[2] F. Jensen, Introduction to computational chemistry, Wiley, 2006 (2-nd Ed)</p> <p>[3] J.M. Goodman, Chemical Applications of Molecular Modeling, RSC, 1999</p> <p>[4] J.P. Doucet, J. Weber, Computer-Aided Molecular Design, 1996, Academic Press, 1996</p> <p>[5] G.H. Grant, W.G. Richards, Computational chemistry, Oxford Sci. Publ., 1995</p>		
OPIEKUN PRZEDMIOTU (IMIE, NAZWISKO, ADRES E-MAIL)		
Dr inż. Edyta Dyguda-Kazimierowicz, Edyta.Dyguda@pwr.edu.pl Dr inż. Paweł Kędzierski, Pawel.Kedzierski@pwr.edu.pl		