

Szczegółowy opis zajęć (KARTA PRZEDMIOTU)

Nazwa zajęć: Elementy modelowania molekularnego

Kod zajęć:

Przynależność do grupy zajęć:

Rodzaj zajęć: kierunkowe
obowiązkowe

Kierunek studiów: Chemia

Poziom studiów: studia drugiego stopnia

Profil studiów: ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Specjalność (specjalizacja): wszystkie specjalności

Rok studiów: 1

Semestr studiów: 1

Formy prowadzenia zajęć, wraz z liczbą godzin dydaktycznych:

wykłady – 15
seminarium – 15
laboratorium - 45

Język/i, w którym/ch prowadzone są zajęcia: polski

Liczba punktów ECTS (zgodnie z programem studiów): 5

* – pozostawić właściwe

1. Założenia przedmiotu:

Zapoznanie studenta z założeniami metod mechaniki molekularnej klasycznej i kwantowej oraz wykorzystanie ich w rozwiązywaniu wybranych zagadnień modelowania molekularnego przy zastosowaniu programów komputerowych

2. Odniesienie kierunkowych efektów uczenia się do form prowadzenia zajęć oraz sposobów weryfikacji i oceny efektów uczenia się osiągniętych przez studenta:

symbol	zakładane efekty uczenia się <i>student, który zaliczył zajęcia:</i>	formy prowadzenia zajęć	sposoby weryfikacji i oceny efektu uczenia się
Wiedza: zna i rozumie			
K2A_W06	posiada wiedzę z matematyki w zakresie pozwalającym na wykorzystanie metod matematycznych do ilościowego opisu materii i procesów chemicznych	wykład	test
K2A_W09	zna wybrane programy komputerowe służące do przewidywania właściwości, wizualizacji i modelowania molekularnego cząsteczek związków organicznych	wykład	test
K2A_W16	ma poszerzoną wiedzę na temat funkcjonowania baz informacji naukowej	wykład	test
Umiejętności: potrafi			
K2A_U05	potrafi korzystać z profesjonalnego oprogramowania w analizie wyników, projektowaniu i przeprowadzaniu symulacji związanych z problemami chemicznymi	laboratorium	test
K2A_U07	potrafi pozyskiwać informacje z literatury, zasobów informacji patentowej, chemoinformatycznych i bioinformatycznych baz danych oraz innych właściwie dobranych źródeł w języku polskim i obcym, potrafi interpretować uzyskane wyniki i wyciągać wnioski	seminarium	test
K2A_U12	ma umiejętność przygotowania prac pisemnych w języku polskim i obcym	laboratorium	test

3. Treści programowe zapewniające uzyskanie efektów uczenia się (zgodnie z programem studiów):

Podstawy metod mechaniki molekularnej klasycznej i kwantowej oraz wykorzystanie ich w rozwiązywaniu wybranych zagadnień modelowania molekularnego przy zastosowaniu programów komputerowych. Ilościowa zależność między strukturą a aktywnością, przykłady analizy QSAR. Analiza oddziaływań białko-ligand. Dokowanie molekularne.

4. Opis sposobu wyznaczania punktów ECTS:

Forma aktywności	Liczba godzin / punktów ECTS
Liczba godzin zajęć, niezależnie od formy ich prowadzenia	75/2,5
Praca własna studenta - przygotowanie do zajęć	30/1
Praca własna studenta - przygotowanie do testów	45/1,5
Inne – konsultacje	5/0
Suma godzin	155

Liczba punktów ECTS przypisana do zajęć	5
---	---

Objaśnienia:

* – praca własna studenta, należy wymienić formy aktywności, np. *przygotowanie do zajęć, interpretacja wyników, opracowanie raportu z zajęć, przygotowanie do egzaminu, zapoznanie się z literaturą, przygotowanie projektu, prezentacji, pracy pisemnej, sprawozdania itp.*
 ** – inne np. *dodatkowe godziny zajęć*

5. Wskaźniki sumaryczne:

- liczba godzin zajęć oraz liczba punktów ECTS na zajęciach z bezpośrednim udziałem nauczycieli akademickich lub innych osób prowadzących zajęcia i studentów: 75/2,5
- liczba godzin zajęć oraz liczba punktów ECTS na zajęciach związanych z prowadzoną w Politechnice Śląskiej działalnością naukową w dyscyplinie lub dyscyplinach, do których przyporządkowany jest kierunek studiów – w przypadku studiów o profilu ogólnoakademickim: 75/2,5
- liczba godzin zajęć oraz liczba punktów ECTS na zajęciach kształtujących umiejętności praktyczne – w przypadku studiów o profilu praktycznym: 0
- liczba godzin zajęć prowadzonych przez nauczycieli akademickich zatrudnionych w Politechnice Śląskiej jako podstawowym miejscu pracy: 75

6. Osoby prowadzące poszczególne formy zajęć (*imię, nazwisko, stopień naukowy lub stopień w zakresie sztuki, tytuł profesora, służbowy adres e-mail*):

dr hab. inż. Ilona Wandzik, prof. Pol. Śl., ilona.wandzik@polsl.pl

dr hab. inż. Monika Krasowska, prof. Pol. Śl., monika.krasowska@polsl.pl

doktorant

7. Szczegółowy opis form prowadzenia zajęć:

Wykład:

1. Mechanika molekularna klasyczna – pola siłowe MM2 i MMFF94, parametryzacja, ograniczenia
2. Kwantowo – mechaniczne metody półempiryczne
3. Metodologia obliczania energii i właściwości fizykochemicznych stanu podstawowego cząsteczki
4. Ilościowa zależność między strukturą a aktywnością, przykłady analizy QSAR
5. Wizualizacja biocząsteczek
6. Analiza oddziaływań białko-ligand
7. Dokowanie molekularne
8. Wyznaczanie trójwymiarowego farmakoforu
9. Biologiczne bazy danych

Seminarium:

Analiza oddziaływań białko-ligand na przykładzie znanych leków

Laboratorium:

1. Obliczanie energii i parametrów stanu podstawowego metodami półempirycznymi
 2. Analiza konformacyjna w pochodnych zawierających wiązania podwójne oraz układach cyklicznych,
 3. Predykcja właściwości fizykochemicznych, obliczanie deskryptorów, analiza QSAR
 4. Wizualizacja białek, analiza struktury II, III, i IV-rzędowej
 5. Predykcja właściwości białek
8. Opis sposobu ustalania oceny końcowej (zasady i kryteria przyznawania oceny, a także sposób obliczania oceny w przypadku zajęć, w skład których wchodzi więcej niż jedna forma prowadzenia zajęć, z uwzględnieniem wszystkich form prowadzenia zajęć oraz wszystkich terminów egzaminów i zaliczeń, w tym także poprawkowych):

Zajęcia w ramach laboratoriów i seminariów podzielone są na trzy bloki. Na każdym z bloków student może uzyskać 25 punktów. Z testu na ostatnim wykładzie student może uzyskać 25 punktów. Łącznie student może uzyskać 100 punktów. Do zaliczenia przedmiotu wymagane jest 50% sumy punktów z czterech testów, czyli 50 punktów.

Ustalenie oceny końcowej:

50-59 dostateczny

60-69 plus dostateczny

70-79 dobry

80-89 plus dobry

90-100 bardzo dobry

9. Sposób i tryb uzupełniania zaległości powstałych wskutek:

- nieobecności studenta na zajęciach

Wykłady są nieobowiązkowe, więc student uzupełnia wiedzę na podstawie literatury. Zajęcia seminaryjne/laboratoryjne są obowiązkowe, więc w razie nieobecności student kontaktuje się z prowadzącym w terminie konsultacji, gdzie uzgadnia sposób indywidualnego uzupełnienia zaległych zajęć.

- różnic w programach studiów osób przenoszących się z innego kierunku studiów, z innej uczelni albo wznowiających studia na Politechnice Śląskiej,

Student powinien spełnić wymagania wstępne i dodatkowe, aby mógł przystąpić do zajęć.

10. Wymagania wstępne i dodatkowe, z uwzględnieniem sekwencyjności zajęć:

Wymagana jest znajomość podstawowego kursu chemii fizycznej, organicznej i nieorganicznej na poziomie studiów I stopnia oraz dodatkowo znajomość zagadnień z przedmiotów dotyczących chemii związków naturalnych.

11. Zalecana literatura oraz pomoce naukowe:

H.A.Staab. Wstęp do teoretycznej chemii organicznej, PWN, Warszawa 1966

R. A. Jackson, Mechanizmy reakcji organicznych, PWN Warszawa, 2007

L.Stryer, Biochemia, PWN, Warszawa 2003

Graham L. Patrick „Chemia medyczna”, WNT Warszawa, 2003.

Paweł Kafarski, Barbara Lejczak „Chemia bioorganiczna”, PWN, Warszawa, 1994.

John McMurry „Chemia organiczna”, PWN, Warszawa, 2005.

Richard B. Silverman, „Chemia organiczna w projektowaniu leków”, WNT, Warszawa 2004

Publikacje naukowe związane z tematyką zajęć

12. Opis kompetencji prowadzących zajęcia (*np. publikacje, doświadczenie zawodowe, certyfikaty, szkolenia itp. związane z treściami programowymi realizowanymi w ramach zajęć*):

Kompetencje prowadzących zajęcia poświadczone są dyplomem ukończenia studiów oraz/lub stopniami doktora i doktora habilitowanego nauk chemicznych, które wynikają z realizowanej pracy badawczej. Ponadto prowadzący posiadają liczne recenzowane publikacje naukowe w dziedzinie chemii organicznej, bioorganicznej i medycznej.

13. Inne informacje:

brak