

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2019/2020

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Technologia Chemiczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: T

Stopień studiów: I

Specjalności: Kataliza Przemysłowa

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

| | |
|---|------------------------------|
| NAZWA PRZEDMIOTU | Modelowanie biokatalizatorów |
| NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM | Modelling of biocatalysts |
| KOD PRZEDMIOTU | WITCh TCh oIS D20 19/20 |
| KATEGORIA PRZEDMIOTU | Przedmioty specjalnościowe |
| LICZBA PUNKTÓW ECTS | 1.00 |
| SEMESTRY | 7 |

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

| SEMESTR | WYKŁADY | ĆWICZENIA | LABORATORIUM | LABORATORIUM KOMPUTERO- WE | PROJEKT | SEMINARIUM |
|---------|---------|-----------|--------------|----------------------------------|---------|------------|
| 7 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 15 |

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zapoznanie studentów z możliwościami zastosowania metod obliczeniowych chemii teoretycznej w zakresie badania i modelowania układów biokatalizator-lidand na poziomie molekularnym.

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Podstawowa wiedza z zakresu chemii organicznej i chemii fizycznej.

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Student zna najważniejsze strategie projektowania nowych związków w oparciu o metody obliczeniowe.

EK2 Wiedza Student zna metody chemii obliczeniowej stosowane w projektowaniu nowych związków aktywnych biologicznie.

EK3 Wiedza Student zna narzędzia stosowane w modelowaniu homologicznym biokatalizatorów.

EK4 Wiedza Znajomość dostępnych komercyjnych i publicznych baz danych oraz narzędzi stosowanych do wirtualnego screeningu.

6 TREŚCI PROGRAMOWE

| SEMINARIUM | | |
|------------|---|------------------|
| LP | TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH | LICZBA GODZIN |
| S1 | Ogólne wprowadzenie do wspomaganego-komputerowo projektowania biocząsteczek. Projektowanie cząsteczek oparte na ligandach. | 1 |
| S2 | Modelowanie homologiczne biokatalizatorów, dokowanie molekularne, modele farmakoforowe. | 2 |
| S3 | Metody mechaniki molekularnej oraz mechaniki kwantowej. Dynamika molekularna w badaniu i projektowaniu związków bioaktywnych. | 2 |
| S4 | Metody cheminformatyki stosowane w badaniu oraz projektowaniu związków bioaktywnych. | 2 |
| S5 | Relacja jakościowa i ilościowa między strukturą lub właściwościami związków a ich aktywnością/reaktywnością (metody SAR, QSAR). Projektowanie związków de novo. | 2 |
| S6 | Bazy danych oraz narzędzia wyszukiwania stosowane w wirtualnym screeningu. | 2 |
| S7 | Strategie racjonalizacji wspomaganego-komputerowo projektowania biocząsteczek. | 2 |
| S8 | Nowoczesne metody obliczeniowe stosowane do badania oddziaływań międzycząsteczkowych. | 2 |

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Wykłady

N2 Prezentacje multimedialne

N3 Dyskusja

8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

| FORMA AKTYWNOŚCI | ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI |
|--|---|
| Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym: | |
| Godziny wynikające z planu studiów | 15 |
| Konsultacje przedmiotowe | 1 |
| Egzaminy i zaliczenia w sesji | 2 |
| Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym: | |
| Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury | 30 |
| Opracowanie wyników | 0 |
| Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji | 10 |
| SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA | 58 |
| SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU | 1.00 |

9 SPOSOBY OCENY

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Test

WARUNKI ZALICZENIA PRZEDMIOTU

W1 Przygotowanie prezentacji multimedialnej

KRYTERIA OCENY

| EFEKT KSZTAŁCENIA 1 | |
|---------------------|---|
| NA OCENĘ 3.0 | Student posiada elementarną wiedzę na temat projektowania nowych związków bioaktywnych. |
| NA OCENĘ 4.0 | Student potrafi opisać jedną strategię projektowania nowych związków w oparciu o metody obliczeniowe. |
| NA OCENĘ 5.0 | Student potrafi opisać dwie strategię projektowania nowych związków w oparciu o metody obliczeniowe. |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 2 | |

| | |
|---------------------|--|
| NA OCENĘ 3.0 | Student posiada elementarną wiedzę na temat metod obliczeniowych stosowanych w projektowaniu nowych związków bioaktywnych. |
| NA OCENĘ 4.0 | Student potrafi opisać metody mechaniki molekularnej oraz mechaniki kwantowej stosowane w badaniu biokatalizatorów. |
| NA OCENĘ 5.0 | Student potrafi opisać metody mechaniki molekularnej oraz mechaniki kwantowej stosowane w badaniu biokatalizatorów. Student potrafi podać przykłady zastosowania metod obliczeniowych. |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 3 | |
| NA OCENĘ 3.0 | Student zna definicje modelu homologicznego białka. |
| NA OCENĘ 4.0 | Student zna narzędzia informatyczne stosowane w modelowaniu homologicznym biokatalizatorów. |
| NA OCENĘ 5.0 | Student zna narzędzia informatyczne stosowane w modelowaniu homologicznym biokatalizatorów. Ponadto potrafi podać kryteria stosowania metody modelowania homologicznego. |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 4 | |
| NA OCENĘ 3.0 | Student zna definicje wirtualnego screeningu oraz potrafi wymienić jedną bazę danych. |
| NA OCENĘ 4.0 | Student zna dostępne komercyjne oraz publiczne bazy danych oraz narzędzia stosowane w wirtualnym screeningu. |
| NA OCENĘ 5.0 | Student zna dostępne komercyjne oraz publiczne bazy danych oraz narzędzia stosowane w wirtualnym screeningu. Ponadto potrafi ocenić kryteria stosowania wybranych deskryptorów oraz funkcji skorupujących. |

10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

| EFEKT KSZTAŁCENIA | ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU | CELE PRZEDMIOTU | TREŚCI PROGRAMOWE | NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE | SPOSOBY OCENY |
|-------------------|--|-----------------|-------------------|-----------------------|---------------|
| EK1 | K1_W07 | Cel 1 | S1 S4 S5 S7 | N1 N2 N3 | P1 |
| EK2 | K1_W07 K1_W08 | Cel 1 | S3 S4 S8 | N1 N2 N3 | P1 |
| EK3 | K1_W07 | Cel 1 | S2 | N1 N2 N3 | P1 |
| EK4 | K1_W07 | Cel 1 | S6 | N1 N2 N3 | P1 |

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] **David C. Young** — *Computational Drug Design: A Guide for Computational and Medicinal Chemists*, N.J., 2009, John Wiley & Sons
- [2] **Paul S. Charifson** — *Practical Application of Computer-Aided Drug Design*, New York, 1997, Marcel Dekker
- [3] **Andrew R. Leach** — *Molecular Modeling: Principles and Applications*, Harlow, 2001, Pearson Education
- [4] **Riccardo Baron** — *Computational Drug Discovery and Design*, New York, 2012, Humana Press, Springer

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA

- [1] **Graham L. Patrick** — *An Introduction to Medicinal Chemistry*, New York, 2005, Oxford University Press

12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH

OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ

dr inż. Paweł Śliwa (kontakt: pawel.sliwa@pk.edu.pl)

OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 dr inż. Paweł Śliwa (kontakt: psliwa@chemia.pk.edu.pl)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejsowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....