

# 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: II

Specjalności: Kataliza Przemysłowa

### 1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Modelowanie biokatalizatorów
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Modeling of biocatalysts
KOD PRZEDMIOTU	WITCh TCh oIIS D19 19/20
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty specjalnościowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	1.00
SEMESTRY	3

### 2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁADY	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	PROJEKT	SEMINARIUM
3	0	0	0	15	0	0

### 3 CELE PRZEDMIOTU

**Cel 1** Zdobyć umiejętności praktycznych dotyczących 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 Umiejętności** Umiejętność wizualizacji struktury kompleksów białko-ligand.

**EK2 Umiejętności** Umiejętność przeszukiwania baz danych związków chemicznych pod kątem aktywności biologicznej.

**EK3 Umiejętności** Umiejętność tworzenia modelu homologicznego białka.

**EK4 Umiejętności** Umiejętność przygotowania danych wejściowych i uruchomienia prostych obliczeń w zakresie dokowania molekularnego.

## 6 TREŚCI PROGRAMOWE

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Modelowanie molekularne wybranych układów biokatalitycznych: przygotowanie plików wejściowych, uruchomienie obliczeń z zastosowaniem specjalistycznego oprogramowania oraz wizualizacja i interpretacja wyników obliczeń.	15

## 7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Konsultacje

N2 Ćwiczenia laboratoryjne

## 8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

FORMA AKTYWNOŚCI	ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI
<b>Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:</b>	
Godziny wynikające z planu studiów	15
Konsultacje przedmiotowe	2
Egzaminy i zaliczenia w sesji	0
<b>Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:</b>	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	30
Opracowanie wyników	10
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	10
<b>SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA</b>	<b>67</b>
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	1.00

## 9 SPOSOBY OCENY

### OCENA FORMUJĄCA

F1 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

### OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Średnia ważona ocen formujących

### KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi otworzyć pliki w formacie pdb za pomocą odpowiedniego oprogramowania oraz korzystając z funkcji graficznych zobrazować strukturę kompleksu białko-ligand, a następnie zapisać jako plik graficzny.
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 3.0	Potrafi narysować elementy strukturalne w celu przeszukiwania bazy danych. Potrafi skopiować wyniki wyszukiwania i zapisać w pliku tekstowym.
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 3.0	Potrafi stworzyć model homologiczny białka za pomocą darmowych narzędzi internetowych.

EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 3.0	Potrafi przygotować pliki białka oraz liganda. Potrafi wykonać dokowanie za pomocą specjalistycznego oprogramowania oraz zapisać wyniki w pliku tekstowym.

## 10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	K2_U01 K2_U08 b	Cel 1	K1	N1 N2	F1 P1
EK2	K2_U01 K2_U02 K2_U10 b	Cel 1	K1	N1 N2	F1 P1
EK3	K2_U01 K2_U02 K2_U08 b	Cel 1	K1	N1 N2	F1 P1
EK4	K2_U01 K2_U02 K2_U08 b	Cel 1	K1	N1 N2	F1 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 ] **Riccardo Baron** — *Computational Drug Discovery and Design*, New York, 2012, Humana Press, Springer
- [3 ] – — *Instrukcja obsługi stosowanego oprogramowania*, –, 0, –

## 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: pśliwa@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)

.....