

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2020/2021

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 20/21
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 miedzycząsteczkowych.	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: pawel.sliwa@pk.edu.pl)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejscowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....