



## KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Zaawansowane metody modelowania molekularne

### Przedmiot

Kierunek studiów

Bioinformatyka

Studia w zakresie (specjalność)

-

Poziom studiów

drugiego stopnia

Forma studiów

stacjonarne

Rok/semestr

2/4

Profil studiów

ogólnoakademicki

Język oferowanego przedmiotu

polski

Wymagalność

obieralny

### Liczba godzin

Wykład

15

Laboratoria

15

Inne (np. online)

0

Ćwiczenia

0

Projekty/seminaria

0

### Liczba punktów ECTS

2

### Wykładowcy

Odpowiedzialny za przedmiot/wykładowca:

dr inż. Łukasz Ławniczak

Odpowiedzialny za przedmiot/wykładowca:

e-mail: lukasz.lawniczak@put.poznan.pl

tel. 61 665 35 34

Wydział Technologii Chemicznej

ul. Berdychowo 4, 60-965 Poznań

### Wymagania wstępne

Na etapie rozpoczęcia zajęć student powinien posiadać podstawową wiedzę w zakresie modelowania molekularnego (np. tworzenie modeli prostych i złożonych cząsteczek, optymalizacja geometryczna) oraz relacji struktura-energia (np. wpływ zmiany konformacji oraz wiązań wodorowy na energię układu). Ponadto, student powinien posiadać praktyczne umiejętności obsługi oprogramowania do modelowania molekularnego, nabyte podczas studiów pierwszego stopnia.

### Cel przedmiotu

Przyswojenie przez studentów wiedzy teoretycznej oraz praktycznej w zakresie zaawansowanych metod modelowania molekularnego. Szczegółowe cele to zaznajomienie studentów z metodami konstrukcji



oraz modyfikacji układów wielocząsteczkowych, jak również wykonywanie bilansu energetycznego dla systemów o zróżnicowanych właściwościach.

### Przedmiotowe efekty uczenia się

#### Wiedza

K\_W03 absolwent zna i rozumie w pogłębionym stopniu zagadnienia z zakresu wybranych nauk ścisłych przydatne do modelowania procesów biologicznych P7U\_W

K\_W04 absolwent zna i rozumie metody, techniki i narzędzia wykorzystywane w procesie rozwiązywania złożonych zadań bioinformatycznych, głównie o charakterze inżynierskim P7U\_W

K\_W09 absolwent zna i rozumie szczegółowe zagadnienia z zakresu modelowania i analizy systemów biologicznych oparte na solidnych podstawach teoretycznych P7U\_W

#### Umiejętności

K\_U01 absolwent potrafi biegle wykorzystywać i integrować informacje pozyskane z literatury i źródeł elektronicznych, w języku polskim i angielskim, dokonywać ich interpretacji i krytycznej oceny P7U\_U

K\_U02 absolwent potrafi wyciągać wnioski, jasno formułować i wyczerpująco uzasadniać swoje opinie na podstawie danych pochodzących z różnych źródeł P7U\_U

K\_U06 absolwent potrafi pod kierunkiem opiekuna naukowego planować i wykonać zadania badawcze z wykorzystaniem metod analitycznych, symulacyjnych oraz eksperymentalnych P7U\_U

#### Kompetencje społeczne

K\_K01 absolwent jest gotów do uczenia się przez całe życie, inspirowania i organizowania procesu uczenia się innych osób P7U\_K

K\_K03 absolwent jest gotów do określania priorytetów służących realizacji zadania zdefiniowanego przez siebie lub innych P7U\_K

K\_K08 absolwent jest gotów do systematycznego aktualizowania swojej wiedzy z zakresu biologii i informatyki oraz dostrzegania możliwości jej praktycznego zastosowania P7U\_K

### Metody weryfikacji efektów uczenia się i kryteria oceny

Efekty uczenia się przedstawione wyżej weryfikowane są w następujący sposób:

#### Wykład:

Po zakończeniu cyklu wykładów wiedza studentów zostanie zweryfikowana w ramach zaliczenia pisemnego z 5 otwartymi pytaniami dotyczącymi zagadnień teoretycznych i praktycznych. Warunkiem zaliczenia jest uzyskanie ilości punktów większej niż 50% przyjętego maksimum.

#### Laboratoria:

W trakcie cyklu zajęć laboratoryjnych wiedza studentów zostanie zweryfikowana poprzez realizację zadań programowych. Na końcu cyklu zajęć laboratoryjnych zostanie przeprowadzone kolokwium praktyczne ze znajomości metod modelowania molekularnego, obejmującego trzy zadania. Warunkiem



zaliczenia jest poprawne rozwiązanie zadań programowych oraz uzyskanie z kolokwium ilości punktów większej niż 50% przyjętego maksimum.

### Treści programowe

W ramach przedmiotu omówione zostaną następujące zagadnienia teoretyczne: energetyczne podstawy struktur wielorzędowych (oddziaływania pomiędzy grupami funkcyjnymi i kluczowe parametry strukturalne), tworzenie monowarstwy solwatacyjnej i modelowanie interakcji z makrocząsteczkami (określanie oddziaływań na przykładzie biocząsteczka-woda), wykorzystanie metod modelowych do analizy i interpretacji rzeczywistych struktur (analiza widm IR), symulacja procesu polimeryzacji (definiowanie monomerów, przebieg procesu łączenia merów i jego konsekwencje strukturalne oraz energetyczne).

Ponadto, zrealizowane zostaną zajęcia dotyczące wiedzy praktycznej w zakresie podstawowych zasad modelowania molekularnego - funkcja conformational search jako narzędzie zautomatyzowanej analizy izomerów konformacyjnych, dobór paraterów i potencjalne problemy w układach wielocząsteczkowych, interpretowanie widm przy użyciu modeli prognostycznych jako szybkie narzędzie do analizy struktur, proces polimeryzacji i relacja struktura-energia dla układów polimerowych.

### Metody dydaktyczne

Wykład obejmujący multimedialną prezentację omawianych treści oraz angażowanie studentów w dyskusje naukowe.

Laboratoria obejmujące praktyczne umiejętności w zakresie obsługi oprogramowania i rozwiązywania problemów dotyczących modelowania molekularnego.

### Literatura

#### Podstawowa

1. J.Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers, Chemia organiczna, tom I, II i III, WNT, Warszawa 2009.
2. J. Gawroński, K. Gawrońska, K. Kacprzak, M. Kwit, Współczesna synteza organiczna, PWN, Warszawa

#### Uzupełniająca

1. J. Skarżewski - Wprowadzenie do syntezy organicznej, PWN, Warszawa 1999
2. M.B. Smith, J. March, Advanced Organic Chemistry, Reaction, Mechanism and Structure, J.Wiley & Sons, New Jersey 2007
3. A.I. Vogel, Preparatyka organiczna, WNT, Warszawa 2006



**Bilans nakładu pracy przeciętnego studenta**

|                                                                                                                                         | Godzin | ECTS |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|------|
| Łączny nakład pracy                                                                                                                     | 50     | 2,0  |
| Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem                                                                               | 30     | 1,5  |
| Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych, przygotowanie do kolokwium/zaliczenia) <sup>1</sup> | 20     | 0,5  |

<sup>1</sup> niepotrzebne skreślić lub dopisać inne czynności