



## KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Podstawy modelowania molekularnego

### Przedmiot

Kierunek studiów

Bioinformatyka

Studia w zakresie (specjalność)

-

Poziom studiów

pierwszego stopnia

Forma studiów

stacjonarne

Rok/semestr

4/7

Profil studiów

ogólnoakademicki

Język oferowanego przedmiotu

polski

Wymagalność

obligatoryjny

### 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 budowy związków organicznych (np. struktury węglowodorów, grupy funkcyjne) oraz ich właściwości (np. oddziaływania pomiędzy poszczególnymi grupami, relacja struktura-właściwości). Ponadto, student powinien posiadać umiejętność pozyskiwania informacji ze wskazanych źródeł oraz świadomość potrzeby rozwijania swoich kompetencji.

### Cel przedmiotu

Przyswojenie przez studentów podstawowej wiedzy teoretycznej oraz praktycznej w zakresie modelowania molekularnego prostych związków organicznych i biocząsteczek. Szczegółowe cele to



zaznajomienie studentów z oprogramowaniem służącym do analizy i oceny właściwości strukturalnych i fizykochemicznych prostych oraz złożonych cząsteczek.

### Przedmiotowe efekty uczenia się

#### Wiedza

K\_W04 absolwent zna i rozumie zagadnienia z zakresu chemii przydatne do formułowania i rozwiązywania prostych zadań bioinformatycznych, obejmujące podstawowe pojęcia i prawa chemii, chemię organiczną i biochemię P6U\_W

K\_W08 absolwent zna i rozumie wybrane grupy związków bioaktywnych, ich właściwości biochemiczne oraz oddziaływanie na komórki i organizmy żywe P6U\_W

K\_W12 absolwent zna i rozumie podstawowe metody, techniki i narzędzia wykorzystywane w procesie rozwiązywania zadań bioinformatycznych, głównie o charakterze inżynierskim P6U\_W

#### Umiejętności

K\_U01 absolwent potrafi pozyskiwać informacje z literatury, baz danych oraz innych właściwie dobranych źródeł, także w języku angielskim P6U\_U

K\_U02 absolwent potrafi integrować i interpretować uzyskane informacje, a także wyciągać wnioski oraz formułować i uzasadniać swoje opinie P6U\_U

K\_U06 absolwent potrafi stosować podstawowe techniki i narzędzia informatyczne do rozwiązywania problemów biologicznych, oceniać ich przydatność P6U\_U

#### Kompetencje społeczne

K\_K01 absolwent jest gotów do uczenia się przez całe życie i podnoszenia swoich kompetencji P6U\_K

K\_K03 absolwent jest gotów do określania priorytetów służących realizacji zadania zdefiniowanego przez siebie lub innych P6U\_K

K\_K06 absolwent jest gotów do wzięcia odpowiedzialności za bezpieczeństwo pracy własnej i innych; podejmowania odpowiednich działań w stanach zagrożenia P6U\_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 egzaminu 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: podstawowe parametry geometryczne oraz rozmieszczenie atomów w przestrzeni, typy modeli związków (projekcje), izomeria i rodzaje izomerów (konstytucyjne, geometryczne, optyczne, konformacyjne), wpływ konformacji na energię cząsteczki (optymalizacja geometryczna), tworzenie i efekt wiązań wodorowych w strukturach checzmicznych (wiązania wewnątrz- i międzycząsteczkowych).

Ponadto, zrealizowane zostaną zajęcia dotyczące wiedzy praktycznej w zakresie podstawowych zasad modelowania molekularnego - przestrzenne operowanie modelami cząsteczek o określonych parametrach strukturalnych w dwóch i trzech wymiarach, podstawowe techniki budowy cząsteczek, modelowanie i pomiar parametrów strukturalnych, budowanie cząsteczek wielofunkcyjnych, minimalizacja energii cząsteczki lub układu cząsteczek w próżni.

### 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 kolokwii) <sup>1</sup>	20	0,5

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