



KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Podstawy modelowania molekularnego [S2Bioinf1>MMOL]

Przedmiot

Kierunek studiów
Bioinformatyka

Rok/Semestr
2/3

Studia w zakresie (specjalność)
–

Profil studiów
ogólnoakademicki

Poziom studiów
drugiego stopnia

Język oferowanego przedmiotu
polski

Forma studiów
stacjonarne

Wymagalność
obligatoryjny

Liczba godzin

Wykład
15

Laboratorium
15

Inne (np. online)
0

Ćwiczenia
0

Projekty/seminaria
0

Liczba punktów ECTS

2,00

Koordynatorzy

dr inż. Łukasz Ławniczak
lukasz.lawniczak@put.poznan.pl

Wykładowcy

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_W02 absolwent zna i rozumie złożone procesy fizykochemiczne i biochemiczne, w tym zasady odpowiedniego doboru materiałów, surowców, aparatury i urządzeń do ich realizacji oraz

charakteryzowania produktów

K_W03 w pogłębionym stopniu zagadnienia z zakresu wybranych nauk ścisłych przydatne do modelowania procesów biologicznych

K_W04 metody, techniki i narzędzia wykorzystywane w procesie rozwiązywania złożonych zadań bioinformatycznych, głównie o charakterze inżynierskim

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

K_U02 absolwent potrafi wyciągać wnioski, jasno formułować i wyczerpująco uzasadniać swoje opinie na podstawie danych pochodzących z różnych źródeł

K_U04 absolwent potrafi stosować zaawansowane techniki i narzędzia informatyczne do rozwiązywania problemów biologicznych oraz ocenić ich przydatność

Kompetencje społeczne:

K_K01 absolwent jest gotów do uczenia się przez całe życie, inspirowania i organizowania procesu uczenia się innych osób

K_K03 absolwent jest gotów do określania priorytetów służących realizacji zadania zdefiniowanego przez siebie lub innych

K_K06 wzięcia odpowiedzialności za ocenę zagrożeń wynikających ze stosowanych technik badawczych i za tworzenie warunków bezpiecznej pracy

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: 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	2,00
Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem	30	1,50
Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych/ćwiczeń, przygotowanie do kolokwίων/egzaminu, wykonanie projektu)	20	0,50