

Opis zajęć (sylabus)

Nazwa zajęć:	Modelowanie molekularne dla projektowania leków	ECTS	4
Nazwa zajęć w j. angielskim:	Molecular modeling for drug design		
Zajęcia dla kierunku studiów:	Technologia Biomedyczna		

Język wykładowy:	polski	Poziom studiów:1	
Forma studiów:	<input checked="" type="checkbox"/> stacjonarne <input type="checkbox"/> niestacjonarne	Status zajęć:	<input type="checkbox"/> podstawowe <input checked="" type="checkbox"/> obowiązkowe <input checked="" type="checkbox"/> kierunkowe <input type="checkbox"/> do wyboru
		Numer semestru: 4	<input type="checkbox"/> semestr zimowy <input checked="" type="checkbox"/> semestr letni
	Rok akademicki, od którego obowiązuje opis (rocznik):	2021/22	Numer katalogowy:

Koordinator zajęć:	Prof. dr hab. Sławomir Filipek			
Prowadzący zajęcia:	Prof. dr hab. Sławomir Filipek (+ dodatkowe osoby na pracowni)			
Założenia, cele i opis zajęć:	Modelowanie molekularnego i wizualizacja struktur chemicznych i biologicznych stanowią obecnie podstawę metod stosowanych do projektowania leków. Celem zajęć jest zapoznanie studentów z metodami modelowania molekularnego i wizualizacji jako wstępem do komputerowego wspomaganie projektowania leków. Zajęcia składają się z wykładu, gdzie przedstawione zostaną podstawy metod modelowania molekularnego, oraz z samodzielnie wykonywanych przez studentów ćwiczeń aby nabyć praktyczne umiejętności posługiwania się programami do wizualizacji i modelowania oraz nabycia umiejętności programowania.			
Formy dydaktyczne, liczba godzin:	a) wykład; liczba godzin 15; b) pracownia; liczba godzin 45;			
Metody dydaktyczne:	Wykład multimedialny. Ćwiczenia wykonywane na pracowni komputerowej.			
Wymagania formalne i założenia wstępne:	Wymagana podstawowa wiedza z budowy cząsteczek chemicznych oraz budowy białek.			
Efekty uczenia się:	treść efektu przypisanego do zajęć:	Odniesienie do efektu. kierunkowego	Siła dla ef. kier*	
Wiedza: (absolwent zna i rozumie)	W1	Student zna metody modelowania molekularnego i wizualizacji molekuł chemicznych i biologicznych.	K_W03	3
	W2	Student rozumie podstawy metod mechaniki i dynamiki molekularnej.	K_W03	2
	W3	Student zna rodzaje oddziaływań pomiędzy lekiem a celem molekularnym.	K_W03	2
Umiejętności: (absolwent potrafi)	U1	Student umie posługiwać się internetowymi bazami danych związków chemicznych i ich celów molekularnych.	K_U01	2
	U2	Student potrafi korzystać z programów do wizualizacji molekuł chemicznych i biologicznych.	K_U02 K_U03 K_U06	3 3 2
	U3	Student potrafi programować i tworzyć skrypty do wykonania złożonych obliczeń i wykresów.	K_U05	1
Kompetencje: (absolwent jest gotów do)	K1	Student potrafi komunikować się na tematy dotyczące modelowania molekularnego w stopniu umożliwiającym aktywne uczestnictwo w środowisku naukowym.	K_K01	2
	K2	Student jest gotów do wykorzystania zgromadzonej wiedzy i umiejętności do samodzielnego zbadania i wizualizacji oddziaływań lek-cel molekularny.	K_K04	2
Treści programowe zapewniające uzyskanie efektów uczenia się:	Modelowanie cząsteczek chemicznych i biologicznych - model CPK; definicja pola siłowego i jego zastosowanie w mechanice i dynamice molekularnej. Rodzaje oddziaływań leków z celami molekularnymi. Programy do wizualizacji molekuł chemicznych i biologicznych. Budowanie i modyfikacje związków chemicznych. Internetowe bazy danych związków chemicznych i celów molekularnych (białka, DNA, RNA). Elementy programowania. Zastosowanie metod sztucznej inteligencji (deep learning) do celów klasyfikacji dużych zbiorów danych.			
Sposób weryfikacji efektów uczenia się:	W1, W2, W3 – pisemny egzamin końcowy z 50% pytań zamkniętych i 50% pytań otwartych. U1, U2, U3, K1, K2 – sprawozdania pisemne na ocenę z praktycznych zadań wykonywanych samodzielnie w trakcie zajęć.			
Szczegóły dotyczące sposobów weryfikacji i form dokumentacji osiągniętych efektów uczenia się:	Sprawozdania pisemne z wykonanych ćwiczeń powinny zawierać skrócony opis wykonywanych w ćwiczeniu czynności oraz odpowiedzi, wraz z uzasadnieniem, na postawione w tekście opisu ćwiczenia pytania.			

Elementy i wagi mające wpływ na ocenę końcową:	Wymagane minimum 50% poprawnych odpowiedzi do zaliczenia wykładu. Dopuszczalna liczba nieobecności usprawiedliwionych na wykładzie - 50 %. Na pracowni wymagane jest zaliczenie wszystkich ćwiczeń.
Miejsce realizacji zajęć:	Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego , ul. Pasteura 1
Literatura podstawowa i uzupełniająca: 1. 2. 3. 4. 5.	
UWAGI	

*) 3 – zaawansowany i szczegółowy, 2 – znaczący, 1 – podstawowy.

Wskaźniki ilościowe charakteryzujące moduł/przedmiot:

Szacunkowa sumaryczna liczba godzin pracy studenta (kontaktowych i pracy własnej) niezbędna dla osiągnięcia zakładanych dla zajęć efektów uczenia się - na tej podstawie należy wypełnić pole ECTS:	100 h
Łączna liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich lub innych osób prowadzących zajęcia:	2,4 ECTS