Karta modułu/przedmiotu

Informacje ogólne o module/przedmiocie	
1. Kierunek studiów: Biotechnologia medyczna	**2. Poziom kształcenia:** studia pierwszego stopnia **3. Forma studiów:** stacjonarne
4. Rok: III	**5. Semestr: V**
6. Nazwa modułu: molekularno-biochemiczny **Nazwa przedmiotu:** Modelowanie struktury przestrzennej cząsteczek związków chemicznych i dużych biocząsteczek	
7. Status modułu/przedmiotu: do wyboru	
8. Jednostka realizująca moduł/przedmiot: Zakład Chemii Ogólnej i Nieorganicznej Katedra Chemii Ogólnej i Analitycznej	
9. Prowadzący moduł/przedmiot: dr hab. Wojciech Baran e-mail: wbaran@sum.edu.pl	
10. Cel kształcenia: Wykorzystanie modelowania molekularnego jako wsparcia badań eksperymentalnych	
11. Wymagania wstępne w zakresie wiedzy, umiejętności i innych kompetencji: Posiadanie wiedzy teoretycznej z zakresu chemii ogólnej, nieorganicznej, organicznej oraz biologii	

12. Efekty kształcenia

Numer efektu kształcenia	Efekty kształcenia Student, który zaliczył moduł/przedmiot:	Odniesienie do efektów kształcenia dla programu	Odniesienie do efektów kształcenia dla obszaru
01	potrafi rysować strukturę związków chemicznych w wymiarze 2D, tworzyć jej trójwymiarową strukturę przestrzenną oraz przeprowadzić jej energetyczną minimalizację	K1_W03 K1_U31 K1_U45 K1_K06 K1_K07	M1_W01 M1_U08 M1_U12 M1_K04 M1_K04
02	potrafi uzyskać z internetowych baz danych strukturę dużej biocząsteczki na podstawie jej nazwy lub identyfikatora struktury, zaprezentować różne formy graficzne jej struktury	K1_W24 K1_W45 K1_U09	M1_W04 - M1_U01
03	potrafi wyznaczyć niektóre właściwości cząsteczki (np. długości wiązań, kąty między wiązaniami, potencjały cząsteczkowe), określić oddziaływania między atomami (np. wiązania wodorowe) wewnątrzcząsteczkowe i między cząsteczkami	K1_W24, K1_W45 K1_U23 K1_U31 K1_U45	M1_W04 - M1_U06 M1_U08 M1_U12
04	posiada znajomość obsługi komputera w zakresie przygotowania prezentacji, gromadzenia danych i podstaw grafiki komputerowej	K1_U23 K1_U21 K1_W09	M1_U06 M1_U06 M1_W01

13. Formy zajęć w odniesieniu do efektów kształcenia

Numer efektu kształcenia	Forma zajęć dydaktycznych					
	wykład	seminarium	ćwiczenia laboratoryjne	ćwiczenia praktyczne	inne	e-learning
01		x				
02		x				
03		x				
04		x				
05		x				
06		x				

14. Treści programowe

14.1. Forma zajęć: Ćwiczenia praktyczne		
C1	Omówienie i prezentacja programów komputerowych do tworzenia struktury cząsteczki (struktury 2D i 3D); internetowe bazy (on-line) chemicznych struktur związków chemicznych w tym leków i ich właściwości fizykochemicznych; internetowe bazy (on-line) krystalicznych struktur biocząsteczek (białka, DNA) (nauczyciel)	5
C2	Omówienie i prezentacja programów komputerowych do badania oddziaływania pomiędzy związkiem chemicznym i biocząsteczką (nauczyciel)	5
C3	Pozyskiwanie programów udostępnianych w ramach licencji open source zdolnych do przetwarzania danych w formacie PDB (nauczyciel)	5
C4	Przeprowadzenie procesu dokowania. Ocena otrzymanych kompleksów pod względem oddziaływań międzycząsteczkowych pomiędzy lekiem i biocząsteczką (nauczyciel)	5
C5	Samodzielne wykonanie przez studenta ćwiczenia, na podstawie omówionych wcześniej tematów i poleceń przygotowanych przez nauczyciela w postaci krótkiej instrukcji	5
C6	Kontynuacja ćwiczenia 5, przygotowanie prezentacji z uzyskanych wyników w programie PowerPoint (możliwe korzystanie przez studentów z własnych komputerów przenośnych)	5
Łącznie		**30**
Łączna liczba godzin z przedmiotu		**30**

15. Metody kształcenia

15.1. Ćwiczenia praktyczne	Prezentacja dostępnych dla studenta programów komputerowych i ich obsługi, na poziomie koniecznym do zrealizowania tematu ćwiczenia; komputery z dostępem do internetu

16. Sposoby weryfikacji efektów kształcenia i sposoby oceny

Numer efektu kształcenia	Sposoby weryfikacji	Warunki zaliczenia
01	Narysowanie struktury chemicznej cząsteczki w wymiarze 2D i 3D; uzyskanie struktury chemicznej związku i leku za pomocą wybranej internetowej bazy danych.	Uzyskanie minimum 60 % poprawnej odpowiedzi, odpowiedź w formie pliku komputerowego
02	Uzyskanie zadanej struktury biocząsteczki z wybranej internetowej bazy danych	Uzyskanie minimum 60 % poprawnej odpowiedzi, odpowiedź w formie pliku komputerowego
03	Omówienie budowy kompleksu lek-bioczasteczka uzyskanego z wybranej bazy internetowej i uzyskanego podczas ćwiczeń praktycznych	Uzyskanie minimum 60 % poprawnej odpowiedzi, odpowiedź w formie pliku komputerowego

17. Obciążenie pracą studenta

Forma aktywności	Przeciętna liczba godzin na zrealizowanie aktywności	
	udział w ćwiczeniach praktycznych	6 x 5h=30h
	udział w konsultacjach	5 x 2h=10h
	łącznie	**40**
	przygotowanie do ćwiczeń	5 x 2h=10
	przygotowanie sprawozdań	5 x 4h=20
	łącznie	**30**
Łącznie		**70**
Sumaryczna liczba punktów ECTS dla przedmiotu		**3**

18. Sumaryczne wskaźniki charakteryzujące przedmiot

Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich	1,74

Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym	1,2

19. Literatura

19.1. Podstawowa

1. D. Steinhilber, M. Schubert-Zsilavecz, H.J. Roth. Chemia medyczna. Warszawa: MedPharmPolska; 2013: 1-25.
2. S. Polak, B. Wiśniowska Modelowanie komputerowe w badaniach nad lekiem - projektowanie i poszukiwanie cząsteczki aktywnej, ocena właściwości fizykochemicznych oraz aktywności biologicznej. Farm. Pol. 2009; 65 (3) 214-223.
3. B. Wiśniowska, S. Polak Modelowanie komputerowe w badaniach nad lekiem - przewidywanie potencjalnych działań toksycznych. Farm. Pol. 2009: 65 (6), 445-452.
4. L.P. Graham. Chemia medyczna. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne PWN, 2003: 179-231

19.2. Uzupełniająca

1. A. Bielański. Podstawy chemii nieorganicznej. Tom I, II. Wydanie szóste, uaktualnione, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2013 (copyright 2008)
2. J. D. Lee. Zwięzła chemia nieorganiczna. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1997
3. P.A. Cox. Chemia nieorganiczna. Krótkie wykłady, Wydawnictwo Naukowe PWN Warszawa, 2003
4. L. Jones, P. W. Atkins. Chemia ogólna. Cząsteczki, materia, reakcje. Tom 1. PWN Warszawa 2009,
5. T. Kędryna. Chemia ogólna z elementami biochemii. Wydawnictwo ZamKor, Kraków 2004

20. Inne przydatne informacje o module/przedmiocie

20.1. Liczebność grup	10 - 20
20.2. Materiały do zajęć	sprzęt komputerowy ze standardowym oprogramowaniem oraz wskazówki do ćwiczeń w formie instrukcji
20.3. Miejsce odbywania się zajęć	Sala seminaryjna wyposażona w sprzęt audio-wideo z dostępem do internetu
20.4. Miejsce i godzina konsultacji	Zgodnie z harmonogramem 2 godz zegarowe 1 raz w tygodniu
20.5. Inne	Koło STN indywidualna praca z nauczycielem akademickim, udział w profesjonalnych badaniach naukowych prezentacja wyników tych badań na studenckich zjazdach naukowych

21. Formy oceny – szczegóły

Efekt	Na ocenę 2	Na ocenę 3	Na ocenę 4	Na ocenę 5
Efekt 01	Otrzymuje student, który nie przyswoił podstawowe umiejętności, nie potrafi nawet z pomocą prowadzącego zajęcia rozwiązać najprostszych zadań	Otrzymuje student, który przyswoił podstawowe umiejętności, potrafi z pomocą prowadzącego zajęcia rozwiązać proste zadania	Otrzymuje student, który przyswoił wiedzę i umiejętności w stopniu dobrym, potrafi samodzielnie rozwiązać większość stawianych problemów	Otrzymuje student, który przyswoił pełny zakres wiedzy i umiejętności, potrafi samodzielnie rozwiązać złożone zadania i problemy