

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2017/2018

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Technologia Chemiczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: T

Stopień studiów: II

Specjalności: Kataliza Przemysłowa

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	ST-2(w) Modelowanie biokatalizatorów
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Modelling of biocatalysts
KOD PRZEDMIOTU	WITCh TCH oIIS D30 17/18
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty specjalnościowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	1.00
SEMESTRY	3

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁADY	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	PROJEKT	SEMINARIUM
3	0	0	0	15	0	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zdobyć umiejętności praktycznych dotyczących zastosowania metod obliczeniowych chemii teoretycznej w zakresie badania i modelowania układów biokatalizator-lidand na poziomie molekularnym

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Podstawowa wiedza z zakresu chemii organicznej i chemii fizycznej

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Umiejętności Umiejętność wizualizacji struktury kompleksów białko-ligand

EK2 Umiejętności Umiejętność przeszukiwania baz danych związków chemicznych pod kątem aktywności biologicznej.

EK3 Umiejętności Umiejętność tworzenia modelu homologicznego białka.

EK4 Umiejętności Umiejętność przygotowania danych wejściowych i uruchomienia prostych obliczeń w zakresie dokowania molekularnego

6 TREŚCI PROGRAMOWE

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Modelowanie molekularne wybranych układów biokatalitycznych: przygotowanie plików wejściowych, uruchomienie obliczeń z zastosowaniem specjalistycznego oprogramowania, wizualizacja i interpretacja wyników obliczeń.	15

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Konsultacje

N2 Ćwiczenia laboratoryjne

8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

FORMA AKTYWNOŚCI	ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	15
Konsultacje przedmiotowe	2
Egzaminy i zaliczenia w sesji	0
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	30
Opracowanie wyników	10
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	10
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	67
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	1.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi otworzyć pliki pdb za pomocą odpowiedniego oprogramowania oraz korzystając z funkcji graficznych zobrazować strukturę kompleksu białko-ligand, a następnie zapisać jako plik graficzny.
NA OCENĘ 4.0	Student potrafi otworzyć pliki pdb za pomocą odpowiedniego oprogramowania oraz korzystając z funkcji graficznych zobrazować strukturę kompleksu białko-ligand, a następnie zapisać jako plik graficzny. Ponadto potrafi zmierzyć odpowiednie odległości oraz kąty pomiędzy atomami badanych kompleksów.
NA OCENĘ 5.0	Student potrafi otworzyć pliki pdb za pomocą odpowiedniego oprogramowania oraz korzystając z funkcji graficznych zobrazować strukturę kompleksu białko-ligand, a następnie zapisać jako plik graficzny. Ponadto potrafi zmierzyć odpowiednie odległości i kąty pomiędzy atomami badanych kompleksów oraz ocenić charakter oddziaływań w miejscu wiążącym białka.
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	

NA OCENĘ 3.0	Potrafi narysować elementy strukturalne w celu przeszukiwania bazy danych. Potrafi skopiować wyniki wyszukiwania i zapisać w pliku tekstowym.
NA OCENĘ 4.0	Potrafi narysować elementy strukturalne w celu przeszukiwania bazy danych. Potrafi skopiować wyniki wyszukiwania i zapisać w pliku tekstowym. Ponadto potrafi zanalizować otrzymane wyniki pod kątem wpływu struktury związków chemicznych na aktywność.
NA OCENĘ 5.0	Potrafi narysować elementy strukturalne w celu przeszukiwania bazy danych. Potrafi skopiować wyniki wyszukiwania i zapisać w pliku tekstowym. Ponadto potrafi zanalizować otrzymane wyniki pod kątem wpływu struktury związków chemicznych na aktywność oraz wskazać propozycje modyfikacji.
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 3.0	Potrafi stworzyć model homologiczny białka za pomocą darmowych narzędzi internetowych.
NA OCENĘ 4.0	Potrafi stworzyć model homologiczny białka za pomocą narzędzi internetowych oraz dostępnego specjalistycznego oprogramowania.
NA OCENĘ 5.0	Potrafi stworzyć model homologiczny białka za pomocą darmowych narzędzi internetowych oraz dostępnego specjalistycznego oprogramowania. Ponadto potrafi ocenić jakość otrzymanych modeli.
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 3.0	Potrafi przygotować pliki białka oraz liganda. Potrafi wykonać dokowanie za pomocą specjalistycznego oprogramowania oraz zapisać wyniki w pliku tekstowym.
NA OCENĘ 4.0	Potrafi przygotować pliki białka oraz liganda. Potrafi wykonać dokowanie za pomocą specjalistycznego oprogramowania oraz zapisać wyniki w pliku tekstowym. Ponadto potrafi modyfikować parametry dokowania.
NA OCENĘ 5.0	Potrafi przygotować pliki białka oraz liganda. Potrafi wykonać dokowanie za pomocą specjalistycznego oprogramowania oraz zapisać wyniki w pliku tekstowym. Ponadto potrafi modyfikować parametry dokowania oraz ocenić wpływ tych zmian na uzyskane wyniki.

10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	K2_U01 K2_U08	Cel 1	K1	N1 N2	P1

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK2	K2_U01 K2_U02 K2_U10	Cel 1	K1	N1 N2	P1
EK3	K2_U01 K2_U02 K2_U08	Cel 1	K1	N1 N2	P1
EK4	K2_U01 K2_U02 K2_U08	Cel 1	K1	N1 N2	P1

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] | **David C. Young** — *Computational Drug Design: A Guide for Computational and Medicinal Chemists*, N.J., 2009, John Wiley & Sons
- [2] | **Riccardo Baron** — *Computational Drug Discovery and Design*, New York, 2012, Humana Press, Springer
- [3] | **Autor** — *Instrukcja obsługi stosowanego oprogramowania*, , 0,

12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH

OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ

dr inż. Paweł Śliwa (kontakt: pawel.sliwa@pk.edu.pl)

OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 dr inż. Paweł Śliwa (kontakt: psliwa@chemia.pk.edu.pl)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejscowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....