

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2018/2019

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Technologia Chemiczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: T

Stopień studiów: II

Specjalności: Innovative Chemical Technologies, Innovative Chemical Technologies (4sem)

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Molecular modeling in drug design
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Molecular modeling in drug design
KOD PRZEDMIOTU	WITCh TCH oIIS D15 18/19
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty specjalnościowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	2.00
SEMESTRY	3

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁADY	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	PROJEKT	SEMINARIUM
3	30	0	0	0	0	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 The lecture reviews the general strategies of computer-aided rationalization in drug design and introduces the modern computational methods used in drug discovery and drug development.

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Basic knowledge of organic chemistry and physical chemistry.

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza The student knows the most important strategies of computer-aided drug design.

EK2 Wiedza The student knows the methods of computational chemistry used in drug design.

EK3 Umiejętności The student can search of protein structure database and can use the free available modeling software and visualization tools.

EK4 Kompetencje społeczne The student is able to work independently and in the group during exercises.

6 TREŚCI PROGRAMOWE

WYKŁADY		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W1	General introduction to computer-aided design of biomolecules, drugs, molecular design based on ligands (molecules).	3
W2	Molecular docking, homologous models of proteins, pharmacophore models.	3
W3	Molecular mechanics and quantum mechanics methods.	3
W4	Cheminformatics used in bioactive molecules design.	3
W5	The qualitative and quantitative relationship between the structure or properties of compounds and reactivity (SAR, QSAR), de novo design.	3
W6	Databases, database search tools and virtual screening.	3
W7	Strategies for rationalization of computer-assisted design of biomolecules.	3
W8	Modern calculation methods used to study intermolecular interactions.	3
W9	Computer demonstrations with free available modeling software.	6

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Lecture

N2 Computer demonstration

N3 Discussion

8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

FORMA AKTYWNOŚCI	ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	30
Konsultacje przedmiotowe	1
Egzaminy i zaliczenia w sesji	2
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	30
Opracowanie wyników	0
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	10
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	73
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	2.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Test

WARUNKI ZALICZENIA PRZEDMIOTU

W1 Passing the test

W2 Attendance at the classes

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 3.0	The student has an elementary knowledge about the design of new bioactive compounds.
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 3.0	The student has elementary knowledge about the computational methods used in the design of new bioactive compounds.
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 3.0	The student can find the protein crystal structure in popular databases.

EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 3.0	The student works independently during exercises.

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_W11 b	Cel 1	W1 W2 W7 W8	N1 N2 N3	P1
EK2	K2_W08 b K2_W11 b	Cel 1	W3 W4 W5	N1 N2 N3	P1
EK3	K2_U01	Cel 1	W4 W6 W9	N1 N2 N3	P1
EK4	K2_K02	Cel 1	W9	N1 N2 N3	P1

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] | **David C. Young** — *A Guide for Computational and Medicinal Chemists*, N.J., 2009, John Wiley & Sons
- [2] | **Paul S. Charifson** — *Practical Application of Computer-Aided Drug Design*, New York, 1997, Marcel Dekker
- [3] | **Andrew R. Leach** — *Molecular Modeling: Principles and Applications*, Harlow, 2001, Pearson Education
- [4] | **Lee Banting and Tim Clark** — *Computational Techniques and Applications*, Cambridge, 2012, Royal Society of Chemistry

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA

- [1] | **Riccardo Baron** — *Computational Drug Discovery and Design*, New York, 2012, Springer

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)

.....