

Nazwa przedmiotu Podstawy modelowania molekularnego biocząsteczek		Kod ECTS 6.5-PMMB												
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot WYDZIAŁ CHEMII Uniwersytetu Opolskiego														
Studia <table border="1"> <tr> <th>kierunek</th> <th>stopień</th> <th>tryb</th> <th>specjalność</th> <th>specjalizacja</th> </tr> <tr> <td>Biologia</td> <td>I (licencjat)</td> <td>stacjonarne</td> <td>Biologia eksperymentalna</td> <td></td> </tr> </table>					kierunek	stopień	tryb	specjalność	specjalizacja	Biologia	I (licencjat)	stacjonarne	Biologia eksperymentalna	
kierunek	stopień	tryb	specjalność	specjalizacja										
Biologia	I (licencjat)	stacjonarne	Biologia eksperymentalna											
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących) Dr hab. Teobald Kupka														
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS												
A. Formy zajęć <ul style="list-style-type: none"> wykład, konwersatorium 		Godziny kontaktowe - udział w wykładach: 15 x 1h = 15h - udział w konwersatoriach: 15 x 2h = 30h - konsultacje 1h Razem 46h = 2 p. ECTS												
B. Sposób realizacji <ul style="list-style-type: none"> zajęcia w sali dydaktycznej 		Praca własna studenta - przygotowanie do konwersatoriów 15h - przygotowanie do egzaminu na ocenę 15h Razem 30h = 1 p. ECTS W (1p. ECTS) + L (2 p. ECST)												
C. Liczba godzin 15W, 30K														
Status przedmiotu <ul style="list-style-type: none"> obowiązkowy 		Język wykładowy polski												
Metody dydaktyczne <ul style="list-style-type: none"> wykład z prezentacją multimedialną konwersatorium w oparciu o prezentacje przygotowane przez studentów 		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne												
		Sposób zaliczenia <ul style="list-style-type: none"> wykład: obecność, zaliczenie na ocenę konwersatorium: zaliczenie z oceną 												
		B. Formy zaliczenia <ul style="list-style-type: none"> konwersatorium: ustalenie oceny zaliczeniowej w oparciu o oceny cząstkowe otrzymywane w trakcie semestru na podstawie aktywnego uczestnictwa w dyskusji 												
		C. Podstawowe kryteria wykład: do zdania egzaminu konieczne jest uczestniczenie w wykładach konwersatorium: ocenę zaliczeniową ustala się na podstawie ocen cząstkowych												
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi														
A. Wymagania formalne: brak B. Wymagania wstępne: podstawy chemii nieorganicznej, organicznej i matematyki.														

Cele przedmiotu

Zrozumienie sposobu modelowania molekularnego za pomocą metod chemii kwantowej i zastosowanie tych narzędzi do badania biocząsteczek.

Treści programowe

A. Problematyka wykładu Przedstawienie głównych koncepcji modelowania molekularnego. Podział i zastosowanie metod chemii kwantowej w chemii i biochemii. Metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, metody minimalizacji, badanie powierzchni energii potencjalnej. Kryteria podziału i przewidywanie oddziaływań międzycząsteczkowych. Obliczenia dla izolowanych cząsteczek i z uwzględnieniem efektu rozpuszczalnika. Omówienie wykorzystania metod modelowania w wyznaczaniu struktury, momentów dipolowych, parametrów widm IR, Ramana i NMR, energii swobodnych, badaniu efektów solwatacyjnych na podstawie obliczeń dla małych, średnich i dużych molekuł ważnych dla układów biologicznych (woda, alkohole, aminy, amidy, aminokwasy, DNA, RNA, białka).

B. Problematyka konwersatorium : modelowanie struktury i wybranych właściwości biomolekuł za pomocą pakietu programów komputerowych.

Wykaz literatury**A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):**

1. L. Piel, „Idee chemii kwantowej”, PWN, Warszawa, 2001.
2. L. Stryer „Biochemia”, wyd. IV, PWN, Warszawa, 1997.

B. Literatura uzupełniająca

1. F. Jensen, „Introduction to computational chemistry”, Wiley, New York, 2007.

Wiedza

K_W03 Zna metody badania biomolekuł OP1A_W03

K_W04 Zna podstawowe idee chemii kwantowej OP1A_W04

Umiejętności

K_U04 Potrafi wykorzystywać poznane metody chemii kwantowej do obliczeń biomolekuł OP1A_U04

K_U05 Umie identyfikować proste biomolekuły na podstawie analizy widm uzyskanych za pomocą poznanych spektroskopii OP1A_U05

Kompetencje społeczne (postawy)

K_K02 Wykazuje aktywną postawę w dążeniu do poznawania metod oraz programów do modelowania struktur OP1A_K02

K_K03 Jest zdolny do rozwiązywania podstawowych problemów z zakresu identyfikacji struktur OP1A_K03

Kontakt

Dr hab. Teobald Kupka, teobaldk@gmail.com