Nazwa przedmiotu
Podstawy modelowania molekularnego biocząsteczek

Kod ECTS
6.5-PMMB

Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot
WYDZIAŁ CHEMII Uniwersytetu Opolskiego

Studia

kierunek	stopień	tryb	specjalność	specjalizacja
Biologia	*I (licencjat)*	*stacjonarne*	*Biologia eksperymentalna*	

Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)
Dr hab. Teobald Kupka, prof. UO

Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin

A. Formy zajęć
- *wykład,*
- *konwersatorium*

B. Sposób realizacji
- *zajęcia w sali dydaktycznej*

C. Liczba godzin
15W, 30K

Liczba punktów ECTS
Godziny kontaktowe
- udział w wykładach: 15 x 1h = 15h
- udział w konwersatoriach: 15 x 2h = 30h
- konsultacje 1h

Razem 46h = 2 p. ECTS

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)

Status przedmiotu
- *obowiązkowy*

Język wykładowy
polski

Metody dydaktyczne
- *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**
- *wykład: obecność, zaliczenie na ocenę*
- *konwersatorium: zaliczenie z oceną*

B. Formy zaliczenia
- *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 zaliczeniowa 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. Piela „Idee chemii kwantowej", PWN, Warszawa, 2001.*
2. *L. Stryer „Biochemia", wyd. IV, PWN, Warszawa, 1997.*

B. Literatura uzupełniająca

1. *F. Jensen, „Introduction to computional 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