

SYLABUS PRZEDMIOTU Modelowanie molekularne w chemii medycznej

1.	Nazwa przedmiotu/modułu w języku polskim oraz angielskim Modelowanie molekularne w chemii medycznej Molecular modelling in medicinal chemistry	
2.	Dyscyplina naukowa Nauki chemiczne	
3.	Język wykładowy polski	
4.	Jednostka prowadząca przedmiot Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego	
5.	Rodzaj przedmiotu/modułu obowiązkowy	
6.	Kierunek studiów (specjalność/specjalizacja) Chemia medyczna	
7.	Poziom studiów (<i>I lub II stopień lub jednolite studia magisterskie</i>) II stopień	
8.	Rok studiów (<i>jeśli obowiązuje</i>) I	
9.	Semestr (<i>zimowy lub letni</i>) letni	
10.	Forma zajęć i liczba godzin Wykład: 15 godz. Laboratorium: 45 godz.	
11.	Wymagania wstępne w zakresie wiedzy, umiejętności i kompetencji społecznych dla przedmiotu/modułu Zaliczone kursy z: matematyki, fizyki, chemii kwantowej, chemii nieorganicznej, chemii organicznej.	
12.	Cele przedmiotu Zaznajomienie studentów z metodami chemii kwantowej mającymi zastosowanie przy rozwiązywaniu podstawowych zagadnień związanych z chemią medyczną.	
13.	Treści programowe Metody obliczeniowych oparte o funkcję falową oraz gęstość elektronową. Bazy funkcyjne używane do modelowania właściwości złożonych układów chemicznych. Baza funkcyjna i jej wpływ na wyniki jakościowe i ilościowe. Krytyczne zasady doboru poziomu obliczeniowego dla zadanego problemu. Energia układu chemicznego. Hiperpowierzchnia energii potencjalnej, konsekwencje jej złożoności. Struktura przestrzenna białek i peptydów – obraz teoretyczny. Oddziaływania międzycząsteczkowe: kompleksy molekularne, oddziaływanie fragmentu białko z metal. Efekty nieliniowe – wpływ na strukturę i stabilność związków chemicznych. Podstawy modelowania właściwości fizykochemicznych.	
14.	Zakładane efekty kształcenia Wiedza • posiada wiedzę w zakresie metod chemii kwantowej oraz odpowiednich pakietów oprogramowania, w szczególności zna podstawy teoretyczne metod modelowania molekularnego. Umiejętności • potrafi znaleźć rozwiązanie problemu chemicznego za pomocą metod chemii kwantowej. Kompetencje społeczne • przyjmuje odpowiedzialność za podejmowane badania.	Symbole K_W03 K_U03 K_K04
15.	Literatura obowiązkowa i zalecana (<i>źródła, opracowania, podręczniki, itp.</i>) 1. L. Piel, "Idée chemii kwantowej", PWN, Warszawa, 2011	

	2. Steinhilber, M. Schubert-zsilavec, „Chemia medyczna Cele leków, substancje czynne, biologia chemiczna”, MedPharm, Wrocław 2021	
16.	Metody weryfikacji zakładanych efektów kształcenia: <u>Wykład:</u> Egzamin pisemny sprawdzający znajomość zagadnień omawianych na wykładzie (K_W03). <u>Laboratorium:</u> Projekt studencki obejmujący wybór metody, uzasadnienie wyboru metody, przeprowadzenie kompletnych obliczeń dla zadanego zagadnienia oraz opracowanie wyników. (K_U03, K_K04).	
17.	Warunki i forma zaliczenia poszczególnych komponentów modułu: <u>Wykład:</u> Ocena pozytywna z egzaminu pisemnego. <u>Laboratorium:</u> Ocena pozytywna za wykonany projekt studencki.	
18.	Nakład pracy studenta	
	forma działań studenta	liczba godzin na realizację działań
	zajęcia (wg planu studiów) z prowadzącym:	15
	- wykład:	45
	- laboratorium:	
	praca własna studenta	
	- przygotowanie do zajęć:	20
	- czytanie wskazanej literatury:	20
	- przygotowanie projektów:	20
	- przygotowanie do sprawdzianów i egzaminu:	20
	Łączna liczba godzin	140
	Liczba punktów ECTS	6