

1.	Nazwa kierunku	biofizyka
2.	Wydział	Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
3.	Cykl rozpoczęcia	2021/2022 (semestr zimowy)
4.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
5.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
6.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Fundamentals of Molecular Modeling

Kod modułu: W4-2BF-MB-21-22

1. Liczba punktów ECTS: 5

2. Zakładane efekty uczenia się modułu			
kod	opis	efekty uczenia się kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
MB_22_1	Posiada podstawową wiedzę z zakresu symulacji dynamiki molekularnej i metody Monte Carlo	KBF_W08	5
MB_22_2	Zna podstawy dynamiki molekularnej	KBF_W08	5
MB_22_3	Potrafi określić zalety i ograniczenia poznanych metod symulacji komputerowych	KBF_W08	5
MB_22_4	Potrafi dokonać wyboru modelu oddziaływań, zespołu statystycznego oraz parametrów klasycznych symulacji odpowiednich dla analizowanego układu	KBF_U02	4
MB_22_5	Potrafi wykorzystać dostępne programy otwarte do modelowania prostych cząsteczek oraz symulacji dynamiki układu atomów i cząsteczek	KBF_U06	4

3. Opis modułu	
Opis	Na wykładzie student zapoznaje się z następującymi zagadnieniami: Mechanika molekularna: - Opis oddziaływań wiążących i niewiążących. - Pola siłowe: MMFF94, GAFF i GROMACS. - Metody optymalizacji: metoda gradientu prostego, najszybszego spadku i gradientów sprzężonych, algorytm Metropolis. Klasyczne symulacje komputerowe: - Modele cząsteczek i potencjały oddziaływań między-molekularnych. Deterministyczne metody symulacji komputerowych – układy izolowane molekuł i układy rozciągnięte (periodyczne warunki brzegowe, konwencja najbliższych obrazów, obciążenie sferyczne, potencjał przesunięty), równania ruchu, metody rozwiązywania równań różnicowych, dynamika z więzami, oddziaływania daleko-zasięgowe, dynamika molekularna dla zespołu mikrokonicznego, kanonicznego i izobaryczno-izotermicznego; wartości średnie i fluktuacje, wielkości termodynamiczne, czasowe funkcje korelacji, czasy korelacji oraz współczynniki transportu, własności strukturalne (dwójkowa funkcja rozkładu, statyczny czynnik struktury), daleko-zasięgowe poprawki energii potencjalnej i ciśnienia. - Stochastyczne metody symulacji komputerowych - metoda Monte Carlo (metoda Metropolis, symulacje dla zespołu kanonicznego). Na zajęciach laboratoryjnych otwarte programy (ang. free software), takie jak GROMACS, Avogadro, VMD, NAMD, zostaną wykorzystane do - Skonstruowania zadanej cząsteczki oraz określenie jej najbardziej prawdopodobnej konformacji. - Przeprowadzenie symulacji dynamiki molekularnej układu atomów. - Przeprowadzenie symulacji dynamiki molekularnej układu prostych

	cząsteczek.
Wymagania wstępne	

4. Sposoby weryfikacji efektów uczenia się modułu			
kod	nazwa (typ)	opis	efekty uczenia się modułu
MB_22_w_1	egzamin	egzamin ustny/pisemny	MB_22_1, MB_22_2, MB_22_3, MB_22_4, MB_22_5
MB_22_w_2	zaliczenie	Dwa kolokwia. Skonstruowanie konfiguracji startowej zadanej molekuly oraz zoptymalizowanie jej struktury. Przygotowanie układu atomów/molekuł dla zadanej gęstości oraz warunków termodynamicznych i uruchomienie symulacji dynamiki molekularnej takiego układu. Ocena zaliczenia będzie średnią arytmetyczną ocen z kolokwiów w skali 2-5.	MB_22_1, MB_22_2, MB_22_3, MB_22_4, MB_22_5

5. Rodzaje prowadzonych zajęć						
kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów uczenia się
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
MB_22_fs_1	wykład	Wykład zagadnień przedstawionych w „Opisie modułu” z wykorzystaniem prezentacji multimedialnej	30	Praca z podręcznikiem; lektura uzupełniająca	60	MB_22_w_1
MB_22_fs_2	laboratorium	Zapoznanie się z dostępnym oprogramowaniem, konstruowanie cząsteczek, dobór pola siłowego oraz wyznaczanie konfiguracji równowagowej. Zaprojektowanie układu molekuł z wykorzystaniem zaimplementowanych pól siłowych oraz symulacji dynamiki molekularnej tego układu	30	Przyswojenie wiedzy z wykładów	45	MB_22_w_2