

1.	Nazwa kierunku	biofizyka
2.	Cykl rozpoczęcia	2017/2018 (semestr zimowy), 2018/2019 (semestr zimowy)
3.	Poziom kształcenia	studia pierwszego stopnia
4.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
5.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Podstawy modelowania molekularnego

Kod modułu: 0305-1BF-13-11

1. Liczba punktów ECTS: 5

2. Zakładane efekty kształcenia modułu			
kod	opis	efekty kształcenia kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
1BF_11_1	Posiada podstawową wiedzę z zakresu symulacji dynamiki molekularnej i metody Monte Carlo	KBF_W08	5
1BF_11_2	Zna podstawy dynamiki molekularnej	KBF_W08	5
1BF_11_3	Potrafi określić zalety i ograniczenia poznanych metod symulacji komputerowych.	KBF_W08	5
1BF_11_4	Potrafi dokonać wyboru modelu oddziaływań, zespołu statystycznego oraz parametrów klasycznych symulacji odpowiednich dla analizowanego układu.	KBF_U02	4
1BF_11_5	Potrafi wykorzystać dostępne programy otwarte do modelowania prostych cząsteczek oraz symulacji dynamiki układu atomów i cząsteczek.	KBF_U06	4

3. Opis modułu	
Opis	<p>Na wykładzie student zapoznaje się z następującymi zagadnieniami:</p> <p>Mechanika molekularna:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Opis oddziaływań wiążących i niewiążących. -Pola siłowe: MMFF94, GAFF i GROMACS. -Metody optymalizacji: metoda gradientu prostego, najszybszego spadku i gradientów sprzężonych, algorytm Metropolis. <p>Klasyczne symulacje komputerowe:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Modele cząsteczek i potencjały oddziaływań między-molekularnych. <p>Deterministyczne metody symulacji komputerowych – układy izolowane molekuł i układy rozciągłe (periodyczne warunki brzegowe, konwencja najbliższych obrazów, obcięcie sferyczne, potencjał przesunięty), równania ruchu, metody rozwiązywania równań różnicowych, dynamika z więzami, oddziaływania daleko-zasięgowe, dynamika molekularna dla zespołu mikrokanonicznego, 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.</p>

	<p>-Stochastyczne metody symulacji komputerowych - metoda Monte Carlo (metoda Metropolis, symulacje dla zespołu kanonicznego).</p> <p>Na zajęciach laboratoryjnych otwarte programy (ang. free software), takie jak GROMACS, Avogadro, VMD, NAMD, zostaną wykorzystane do</p> <p>-Skonstruowania zadanej cząsteczki oraz określenie jej najbardziej prawdopodobnej konformacji.</p> <p>-Przeprowadzenie symulacji dynamiki molekularnej układu atomów.</p> <p>-Przeprowadzenie symulacji dynamiki molekularnej układu prostych cząsteczek.</p>
Wymagania wstępne	Elementarna wiedza z zakresu mechaniki klasycznej

4. Sposoby weryfikacji efektów kształcenia modułu			
kod	nazwa (typ)	opis	efekty kształcenia modułu
1BF_11_w_1	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.	1BF_11_1, 1BF_11_2, 1BF_11_3, 1BF_11_4, 1BF_11_5
1BF_11_w_2	aktywność na zajęciach	Dodatkowym czynnikiem ostatecznej oceny zaliczenia będzie aktywność i samodzielność w trakcie zajęć laboratoryjnych.	1BF_11_1, 1BF_11_2, 1BF_11_3, 1BF_11_4, 1BF_11_5

5. Rodzaje prowadzonych zajęć						
kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów kształcenia
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
1BF_11_fs_1	wykład	Wykład zagadnień przedstawionych w „Opisie modułu” z wykorzystaniem prezentacji multimedialnej.	30	Praca z podręcznikiem; lektura uzupełniająca	60	1BF_11_w_1, 1BF_11_w_2
1BF_11_fs_2	laboratorium	Zapoznanie się z dostępnym oprogramowaniem, konstruowanie cząsteczek, dobór pola siłowego oraz wyznaczenie konfiguracji równowagowej. Zaprojektowanie układu molekuł z wykorzystaniem zaimplementowanych pól siłowych oraz symulacji dynamiki molekularnej tego układu.	30	Przyswojenie wiedzy z wykładów	30	1BF_11_w_1