

1.	Field of study	Chemistry
2.	Academic year of entry	2018/2019 (summer term)
3.	Level of qualifications/degree	second-cycle studies
4.	Degree profile	general academic
5.	Mode of study	full-time

Module: Molecular modelling

Module code: 0310-CH-S2-B-MM

1. Number of the ECTS credits: 2

2. Learning outcomes of the module			
code	description	learning outcomes of the programme	level of competence (scale 1-5)
0310-CH-S2-B-MM_1	Zna podstawowe prawa mechaniki kwantowej i wyjaśnia strukturę elektronową atomów i cząsteczek.	CH_W02	3
0310-CH-S2-B-MM_2	Potrafi scharakteryzować i sklasyfikować oddziaływania międzycząsteczkowe.	CH_W02	3
0310-CH-S2-B-MM_3	Ma świadomość komplementarności badań teoretycznych i doświadczalnych i ich roli w poznawaniu struktury materii.	CH_K09 CH_K10	3 3
0310-CH-S2-B-MM_4	Objaśnia powiązania chemoinformatyki z chemią organiczną oraz charakteryzuje metody projektowania związków biologicznie aktywnych z uwzględnieniem dokowania molekularnego.	CH_W08 CH_W09	4 5
0310-CH-S2-B-MM_5	Posługuje się dostępnymi chemoinformatycznymi bazami danych i różnymi systemami kodowania związków chemicznych.	CH_U11 CH_U12	4 4
0310-CH-S2-B-MM_6	Analizuje dane zawarte w różnych standardach wymiany molekularnej i generuje deskryptory molekularne i używa ich do modelowania QSAR i QSPR.	CH_U12 CH_U13 CH_U14	4 3 4
0310-CH-S2-B-MM_7	Opracowuje procedurę projektowania nowych leków.	CH_U05 CH_U11 CH_U12 CH_U13	2 4 4 3
0310-CH-S2-B-	Postępuje zgodnie z zasadami etyki pracy z wykorzystaniem zasobów internetowych.	CH_K06	4

MM_8		CH_K08	5
------	--	--------	---

3. Module description

Description	Moduł modelowanie molekularne ma za zadanie zapoznanie studentów z podstawowymi koncepcjami i pojęciami chemoinformatyki w szczególności problemów reprezentacji obiektów molekularnych in silico, ich kodowania oraz przekształceń. Wprowadza studentów w problemy projektowania związków biologicznie aktywnych.
Prerequisites	Znajomość pojęć matematyki wyższej (pochodnej, całki, prostych równań różniczkowych). Znajomość rachunku wektorowo-macierzowego.

4. Assessment of the learning outcomes of the module

code	type	description	learning outcomes of the module
0310-CH-S2-B-MM_w_1	egzamin	Egzamin pisemny weryfikujący wiedzę w oparciu o treści wykładów i ćwiczeń oraz wskazaną w sylabusie literaturę.	0310-CH-S2-B-MM_1, 0310-CH-S2-B-MM_2, 0310-CH-S2-B-MM_3, 0310-CH-S2-B-MM_4
0310-CH-S2-B-MM_w_2	kolokwium	Sprawdzian pisemny weryfikujący wiedzę oraz umiejętności w rozwiązywaniu zadań i problemów z zakresu chemoinformatyki.	0310-CH-S2-B-MM_5, 0310-CH-S2-B-MM_6, 0310-CH-S2-B-MM_7, 0310-CH-S2-B-MM_8
0310-CH-S2-B-MM_w_3	sprawozdanie	Ocena poprawności wykonania projektu.	0310-CH-S2-B-MM_5, 0310-CH-S2-B-MM_6, 0310-CH-S2-B-MM_7, 0310-CH-S2-B-MM_8
0310-CH-S2-B-MM_w_4	ocenie ciągłe	Ocena praktycznych umiejętności pracy w laboratorium.	0310-CH-S2-B-MM_5, 0310-CH-S2-B-MM_6, 0310-CH-S2-B-MM_7, 0310-CH-S2-B-MM_8

5. Forms of teaching

code	form of teaching			required hours of student's own work		assessment of the learning outcomes of the module
	type	description (including teaching methods)	number of hours	description	number of hours	
0310-CH-S2-B-MM_fs_1	lecture	Wykład omawiający podstawowe zagadnienia projektowania molekularnego.	15	Praca ze wskazaną literaturą przedmiotu obejmująca samodzielne przyswojenie wiedzy odnośnie wskazanych zagadnień na wykładzie.	10	0310-CH-S2-B-MM_w_1
0310-CH-S2-B-MM_fs_2	laboratory classes	Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące projekt obliczeniowy z zakresu chemoinformatyki i projektowania molekularnego.	20	Przygotowanie teoretyczne do zajęć z tematów poruszanych na wykładzie. Rozwiązywanie zagadnień podanych przez	15	0310-CH-S2-B-MM_w_2, 0310-CH-

				prowadzącego.		S2-B-MM_w_3, 0310- CH-S2-B-MM_w_4
--	--	--	--	---------------	--	--------------------------------------