

1.	Nazwa kierunku	biofizyka
2.	Wydział	Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
3.	Cykl rozpoczęcia	2020/2021 (semestr zimowy), 2021/2022 (semestr zimowy), 2022/2023 (semestr zimowy)
4.	Poziom kształcenia	studia pierwszego stopnia
5.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
6.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Podstawy modelowania molekularnego

Kod modułu: W4-1BF-20-34

1. Liczba punktów ECTS: 5

2. Zakładane efekty uczenia się modułu			
kod	opis	efekty uczenia się kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
1BF_34_1	Posiada podstawową wiedzę z zakresu symulacji dynamiki molekularnej i metody Monte Carlo	KBF_W08	5
1BF_34_2	Zna podstawy dynamiki molekularnej	KBF_W08	5
1BF_34_3	Potrafi określić zalety i ograniczenia poznanych metod symulacji komputerowych.	KBF_W08	5
1BF_34_4	Potrafi dokonać wyboru modelu oddziaływań, zespołu statystycznego oraz parametrów klasycznych symulacji odpowiednich dla analizowanego układu.	KBF_U02	4
1BF_34_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 rozciągle (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. - 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	Elementarna wiedza z zakresu mechaniki klasycznej

4. Sposoby weryfikacji efektów uczenia się modułu			
kod	nazwa (typ)	opis	efekty uczenia się modułu
1BF_34_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 kolokwii w skali 2-5.	1BF_34_1, 1BF_34_2, 1BF_34_3, 1BF_34_4, 1BF_34_5
1BF_34_w_2	aktywność na zajęciach	Dodatkowym czynnikiem ostatecznej oceny zaliczenia będzie aktywność i samodzielność w trakcie zajęć laboratoryjnych.	1BF_34_1, 1BF_34_2, 1BF_34_3, 1BF_34_4, 1BF_34_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	
1BF_34_fs_1	wykład	Wykład zagadnień przedstawionych w „Opisie modułu” z wykorzystaniem prezentacji multimedialnej.	30	Praca z podręcznikiem; lektura uzupełniająca	60	1BF_34_w_1, 1BF_34_w_2
1BF_34_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	30	1BF_34_w_1