**Nazwa przedmiotu:**

Modelowanie obiektów fizykochemicznych/Komputerowe projektowanie leków\*

**Koordynator przedmiotu:**

dr inż. Kamil Paduszyński/dr hab. inż. Filip Stefaniak

**Status przedmiotu:**

Obowiązkowy

**Poziom kształcenia:**

Studia II stopnia

**Program:**

Technologia Chemiczna

**Grupa przedmiotów:**

Obowiązkowe

**Kod przedmiotu:**

brak

**Semestr nominalny:**

2 / rok ak. 2019/2020

**Liczba punktów ECTS:**

2

**Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się:**

1. godziny kontaktowe 30h, w tym:
a) obecność na wykładach – 15h,
b) obecność na laboratoriach komputerowych – 15h
4. przygotowanie do egzaminu i obecność na kolokwiach – 15 h
Razem nakład pracy studenta: 30 h + 15 h = 45 h, co odpowiada 2 punktom ECTS.

**Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich:**

1. obecność na wykładach – 15h,
2. obecność na laboratoriach komputerowych – 15h
Razem: 15h + 15h = 30h, co odpowiada 1 punktowi ECTS.

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

**Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym:**

Zajęcia praktyczne w laboratorium komputerowym (1 punkt ECTS).

**Formy zajęć i ich wymiar w semestrze:**

|  |  |
| --- | --- |
| Wykład: | 15h |
| Ćwiczenia: | 0h |
| Laboratorium: | 15h |
| Projekt: | 15h |
| Lekcje komputerowe: | 0h |

**Wymagania wstępne:**

Prerekwizyty: Chemia fizyczna

**Limit liczby studentów:**

-

**Cel przedmiotu:**

Zasadniczym celem wykładu jest przedstawienie studentowi najważniejszych metod korelacji i/lub przewidywania różnych właściwości fizykochemicznych substancji organicznych w stanie czystym. Wykład składa się z czterech części. Część pierwsza obejmuje ogólny przegląd i klasyfikację metod oraz omówienie podstawowych założeń metod z rodziny QSPR (ang. quantitative structure-property relationship), w tym metod udziałów grupowych (GCM, ang. group contribution method). Podczas kolejnych wykładów student zapoznaje się z ogólną procedurą opracowywania korelacji omówionych w części pierwszej, definicją deskryptora molekularnego, jak również metodologią ich doboru, w zależności od danego problemu (część druga i trzecia). Zasadniczą i ostatnią część wykładu stanowi przegląd różnego typu metod QSPR i GCM do przewidywania szerokiej gamy właściwości fizykochemicznych: gęstość, objętość molowa, lepkość, napięcie powierzchniowe, współczynnik załamania światła, entalpia parowania, prężność pary nasyconej, normalna temperatura wrzenia, entalpia topnienia, normalna temperatura topnienia, rozpuszczalność w wodzie, indeksy toksyczności, współczynniki podziału (np. oktanol-woda).

**Treści kształcenia:**

1. Klasyfikacja i charakterystyka empirycznych metod korelacji/przewidywania różnych właściwości fizykochemicznych związków organicznych
1.1. Metody QPPR/QSAR/QSPR, metody udziałów grupowych, metody oparte na podobieństwie strukturalnym i/lub wymianie (podstawieniu) grup funkcyjnych, zastosowanie sztucznych sieci neuronowych – przedstawienie ogólnych idei oraz przykłady
1.2. Wprowadzenie do CAMD (ang. Computer-Aided Molecular Design). Kodowanie struktur chemicznych w systemie SMILES.
2. Konstrukcja nowego modelu
2.1. Budowa banku danych wejściowych
2.2. Klasyfikacja danych
2.3. Wyznaczanie parametrów modelu – podstawowe algorytmy optymalizacji
2.4. Testowanie modelu, statystyczna analiza wyników.
3. Deskryptory molekularne
3.1. Wzór strukturalny w świetle teorii grafów – macierz sąsiedztwa A i macierze pochodne.
3.2. Indeksy topologiczne wyprowadzone z macierzy A.
4. Właściwości fizykochemicznych – przegląd wybranych modeli
4.1. Właściwości wolumetryczne: gęstość, objętość molowa.
4.2. Lepkość dynamiczna i kinematyczna, napięcie powierzchniowe, współczynnik załamania światła.
4.3. Temperatury i entalpie przemian fazowych, prężność pary.
4.4. Rozpuszczalność w wodzie.
4.5. Ekotoksyczność, współczynniki podziału (oktanol-woda, powietrze-woda, gleba-woda).

**Metody oceny:**

Zaliczenie pisemne

**Egzamin:**

nie

**Literatura:**

Literatura podstawowa:
1. Reinhard, M.; Drefahl, A.: Handbook for Estimating Physicochemical Properties of Organic Compounds, John Wiley & Sons, 1999 (dostęp przez BG PW).
Literatura uzupełniająca:
1. Todeschini, R.; Consonni, V. Handbook of Molecular Descriptors, John Wiley & Sons, 2011.
2. Boethling, R. S.; Mackay, D. Handbook of Property Estimation Methods for Chemicals. Environmental and Health Sciences, Lewis Publishers, 2000.
3. Publikacje naukowe w czasopismach chemicznych.
4. Materiały drukowane do wykładu. Zasoby internetowe.

**Witryna www przedmiotu:**

-

**Uwagi:**

## Charakterystyki przedmiotowe

### Profil ogólnoakademicki - wiedza

**Charakterystyka W01:**

Posiada wiedzę z matematyki i fizyki w zakresie pozwalającym na wykorzystanie pojęć matematycznych i fizycznych do opisu procesów chemicznych i wykonywania zaawansowanych obliczeń praktycznych

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:**

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka W02:**

Posiada rozszerzoną wiedzę z podstawowych działów chemii fizycznej i termodynamiki chemicznej

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:**

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - umiejętności

**Charakterystyka U01:**

Potrafi sprawnie pozyskiwać informacje z literatury, baz danych i innych źródeł; potrafi samodzielnie interpretować uzyskane informacje, oraz oceniać ich rzetelność i wyciągać z nich wnioski, formułować i uzasadniać opinie

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:**

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka U02:**

Potrafi posługiwać się zaawansowanymi technikami informacyjno-komunikacyjnymi, w tym programami komputerowymi wspomagającymi realizację zadań inżynierskich z zakresu technologii chemicznej

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:**

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka U03:**

Potrafi wykorzystać metody obliczeniowe i statystyczne do formułowania i rozwiązywania problemów w zakresie technologii chemicznej

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:**

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka U04:**

W oparciu o wiedzę ogólną wyjaśnia podstawowe zjawiska związane z istotnymi procesami w technologii i inżynierii chemicznej

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:**

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - kompetencje społeczne

**Charakterystyka K01:**

Rozumie potrzebę dokształcania się i podnoszenia swoich kompetencji zawodowych i osobistych; ma umiejętności pozwalające na prowadzenie efektywnego procesu samokształcenia

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:**

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**