

**Karta przedmiotu**

Nazwa i kod przedmiotu	Statistical mechanics of biological macromolecules (auditorium classes), PG_00119777						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	2	Język wykładowy			angielski brak uwag		
Semestr studiów	3	Liczba punktów ECTS			2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. Józef Liwo				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	30.0	0.0	0.0	0.0	30
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	30		5.0		15.0	50
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z podstawami mechaniki statystycznej biopolimerów ze szczególnym uwzględnieniem warunków i mechanizmów tworzenia struktury.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_K06] W sposób świadomy i odpowiedzialny podejmuje się realizację zadań badawczych, rozumiejąc społeczne aspekty praktycznego zastosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związaną z tym odpowiedzialność.	Student stosuje metody mechaniki statystycznej do opisu makromolekuł biologicznych.	[SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SK5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Student operuje pogłębioną wiedzą w zakresie mechaniki statystycznej makromolekuł biologicznych.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
	[CHEMMU2_W06] Stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności.	Student stosuje aparat analizy matematycznej w zakresie opisu makrocząsteczek na gruncie mechaniki statystycznej.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SW5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Student krytycznie ocenia wyniki zastosowania mechaniki statystycznej do opisu struktury i energetyki makromolekuł biologicznych.	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SU5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	Student zna ograniczenia swojej wiedzy w dziedzinie analizy matematycznej, fizyki statystycznej i fizykochemii biomolekuł i potrafi ją uzupełnić.	[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SK5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_U11] Komunikuje się w języku obcym na poziomie B2+ Europejskiego Systemu Opisu Kształcenia Językowego oraz potrafi posługiwać się specjalistyczną terminologią.	Student poznaje terminologię angielską w zakresie mechaniki statystycznej i fizykochemii makromolekuł biologicznych.	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
Treści przedmiotu	Elementy mechaniki statystycznej: zespoły statystyczne, połączenie termodynamiczne. Mechanika statystyczna łańcuchów polimerów. Potencjały średniej siły. Tworzenie struktury i samoorganizacja w biopolimerach jako przejście fazowe. Jednowymiarowe przejście helisa-kłębek. Oddziaływania, w których pośredniczy rozpuszczalnik, które są ważne w stabilizacji struktury biopolimeru. Polimery w dobrych i złych rozpuszczalnikach. Globalne minimum energii potencjalnej i swobodnej a stabilność struktury polimeru. Zwijalność. Proste modele siatkowe do badania zwijalności. Karjobrazy energii swobodnej makrocząsteczek biologicznych oraz metody ich badania. Gruboziarniste pola siłowe do symulacji biopolimerów jako potencjały średniej siły.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Znajomość zastosowań mechaniki statystycznej w chemii.		
Sposoby i kryteria oceniania osiąganych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Rozwiązanie zadań problemowych	51.0%	50.0%
	Test	51.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	D. McQuarrie: Statistical mechanics  A. Leach: Molecular modeling: principles and applications	
	Uzupełniająca lista lektur	T. Schlick: Molecular dynamics and simulations	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	1. Obliczyć energię cząsteczki białka w modelu HP na siatce sześcienniej.  2. Przeprowadzić przy pomocy serwera UNRES minimalizację energii cząsteczki krambiny oraz zinterpretować odstępstwa od struktury eksperymetalnej.  3. Przy pomocy serwera UNRES wyznaczyć krzywą zmiany pojemności cieplnej z temperaturą klatki tryptofanowej oraz zinterpretować występujące na niej maksimum.		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		