

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	QSAR in toxicology (Ćw. laboratoryjne), PG_00051256						
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		
Semestr studiów	3	Liczba punktów ECTS			2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska -> Pracownia Chemoinformatyki Środowiska						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. Tomasz Puzyn				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	30.0	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	<ul style="list-style-type: none"> <li>Osiągnięcie zaawansowanych umiejętności w zakresie tworzenia i walidacji modeli QSAR</li> <li>Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem umożliwiającym tworzenie i walidację modeli QSAR do przewidywania toksyczności.</li> <li>Zapoznanie studentów ze skryptami Python/R wykorzystywanymi w tworzeniu i walidacji modeli QSAR</li> </ul>						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_U05] Prezentuje wyniki badań w postaci samodzielnie zredagowanej pracy pisemnej, zawierającej opis i uzasadnienie celu pracy, przyjętą metodologię, wyniki oraz ich znaczenie na tle innych podobnych badań.	Prezentacja badań: Przedstawienie wyników badań w dobrze skonstruowanym, samodzielnie zredagowanym artykule pisemnym. Uzasadnienie celu: Jasny opis i uzasadnienie celu badania. Wyjaśnienie metodologii: Wyczerpujące wyjaśnienie przyjętej metodologii. Interpretacja wyników: Skuteczna interpretacja i prezentacja wyników badań. Ocena trafności: Ocena i omówienie znaczenia wyników w kontekście innych podobnych badań.	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_W03] Wykazuje się pogłębioną wiedzą w zakresie nowoczesnych technik pomiarowych stosowanych w analizie chemicznej.	Opanuj zasady QSAR: Zrozumienie i zastosowanie modeli QSAR w toksykologii. Techniki pomiarowe: Wykorzystanie nowoczesnych technik, takich jak spektroskopia, chromatografia i spektrometria mas. Analiza danych: Analiza danych chemicznych pod kątem oceny toksykologicznej. Krytyczna ocena: Ocena mocnych stron i ograniczeń metod pomiarowych. Świadomość regulacyjna: Zrozumienie etycznych i regulacyjnych aspektów analizy chemicznej. Badania i komunikacja: Angażowanie się w badania i skuteczne przekazywanie wyników.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_U06] Prezentuje w sposób przystępny wyniki odkryć naukowych z chemii i dyscyplin pokrewnych.	Przystępna prezentacja: Prezentowanie odkryć naukowych w dziedzinie chemii i dyscyplin pokrewnych w przystępny i zrozumiały sposób. Skuteczna komunikacja: Jasno komunikuje złożone koncepcje naukowe różnym odbiorcom. Interdyscyplinarne zrozumienie: Wykazanie się zrozumieniem interdyscyplinarnych powiązań między chemią i dziedzinami pokrewnymi. Umiejętności upraszczania: Upraszczenie i wyjaśnianie wyników badań bez uszczerbku dla dokładności. Angażująca prezentacja: Prowadzenie angażujących i pouczających prezentacji na temat odkryć naukowych.	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_W04] Stosuje nabytą wiedzę do pogłębionego opisu właściwości połączeń chemicznych, metody ich syntezy oraz analizy.	Dogłębny opis związków chemicznych: Zastosowanie wiedzy QSAR do kompleksowego opisu właściwości kombinacji chemicznych. Praktyczne zastosowanie: Wdrażanie nabytej wiedzy w praktycznych scenariuszach w celu analizy właściwości chemicznych i przewidywania skutków toksykologicznych. Umiejętności rozwiązywania problemów: Rozwijanie umiejętności rozwiązywania problemów w celu sprostania wyzwaniom związanym z syntezą i analizą połączeń chemicznych przy użyciu modeli QSAR.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport

	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	<p>[CHEMMU2_K03] Rozumie konieczność systematycznej pracy nad różnymi projektami o charakterze długofalowym oraz umie określić priorytety służące realizacji podjętych zadań.</p>	<p>Systematyczne podejście: Wykazanie się umiejętnością systematycznej pracy nad długoterminowymi projektami toksykologicznymi z wykorzystaniem metodologii QSAR.</p> <p>Zarządzanie projektami: Rozumienie i stosowanie skutecznych technik zarządzania projektami w celu ustalania priorytetów i wykonywania złożonych zadań w badaniach QSAR.</p> <p>Umiejętności ustalania priorytetów: Rozwijanie umiejętności ustalania priorytetów i zarządzania nimi w celu zapewnienia terminowej realizacji wielu zadań w badaniach toksykologicznych.</p> <p>Planowanie strategiczne: Wykazanie umiejętności planowania strategicznego w celu zarządzania długoterminowymi projektami, zapewniając zgodność z celami badawczymi i harmonogramami.</p> <p>Realizacja zadań: Wdrażanie skutecznych strategii realizacji zadań w celu obsługi różnych etapów projektów QSAR od ich powstania do zakończenia.</p>	<p>[SK2] prezentacja/projekt/referat/raport</p>
	<p>[CHEMMU2_W11] Wykazuje się pogłębioną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie.</p>	<p>Aktualne osiągnięcia: Wykazanie się kompleksową wiedzą na temat najnowszych osiągnięć w dziedzinie chemii.</p> <p>Najnowsze odkrycia: Zrozumienie i wyjaśnienie najnowszych odkryć w dziedzinie chemii.</p> <p>Świadomość naukowa: Bądź na bieżąco z najnowszymi badaniami i trendami w naukach chemicznych.</p> <p>Integracja wiedzy: Integracja aktualnych osiągnięć i odkryć z badaniami i zastosowaniami QSAR.</p> <p>Krytyczna analiza: Krytyczna analiza nowych odkryć i ich implikacji dla toksykologii i modeli QSAR.</p>	<p>[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport</p>
	<p>[CHEMMU2_K07] Potrafi myśleć i działać w sposób przedsiębiorczy.</p>	<p>Przedsiębiorcze myślenie: Rozwijanie kreatywnego i innowacyjnego myślenia w badaniach QSAR.</p> <p>Wykorzystywanie możliwości: Identyfikacja i wykorzystywanie możliwości w toksykologii.</p> <p>Strategiczne zarządzanie projektami: Planowanie i zarządzanie projektami QSAR w sposób przedsiębiorczy.</p> <p>Rozwiązywanie problemów: Stosowanie przedsiębiorczego podejścia do rozwiązywania złożonych problemów.</p> <p>Efektywne wykorzystanie zasobów: Efektywne zarządzanie zasobami w celu osiągnięcia celów.</p>	<p>[SK2] prezentacja/projekt/referat/raport</p>

Treści przedmiotu	<p>1. Wprowadzenie do gromadzenia i przechowywania danych wykorzystywanych do opracowywania modeli QSAR2. Zaawansowane metody opisu właściwości strukturalnych związków chemicznych, metody wyboru zestawu kluczowych właściwości wpływających na toksyczność, zaawansowane metody definiowania zależności między toksycznością a właściwościami strukturalnymi, w tym podejścia jakościowe i ilościowe.3. Zaawansowane metody walidacji modeli QSAR i oceny domeny stosowalności.4. Metody raportowania modeli QSAR, np. QMRF.5. Przegląd dostępnego oprogramowania umożliwiającego modelowanie QSAR.</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	<p>Wymagania formalne - brak Wymagania wstępne: Wprowadzenie do chemii cyfrowej, wprowadzenie do matematyki, wprowadzenie do chemii, wprowadzenie do Python/R</p>		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	poprawność raportów z przydzielonych projektów	51.0%	50.0%
	Finalny projekt	51.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<p>R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 200</p> <p>K. Roy, S. Kar, R. Das Narayan: A Primer on QSAR/QSPR Modeling - Fundamental Concepts. Springer 2015. ISBN: 978-3-319-17281-1.</p> <p>T. Puzyn, J. Leszczynski, M. T. D. Cronin: Recent Advances in QSAR Studies: Methods and Applications. Springer 2010. ISBN: 978-1-4020-9782-9.</p>	
	Uzupełniająca lista lektur	<p>S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (red): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009</p> <p>T. Puzyn, A. Mostrąg-Szlichtyng, N. Suzuki, M. Haranczyk. Metody chemometryczne w ocenie ryzyka: Ilościowe zależności pomiędzy strukturą chemiczną a właściwościami (QSPR) dla nowych rodzajów zanieczyszczeń chemicznych. W: Zuba D., Parczewski A. (Eds.): Chemometria w nauce i praktyce. Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, Kraków (2009). ISBN: 978-83-87425-38-8</p>	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania			
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.