

Informačný list predmetu

Akademický rok 2024/2025

Vysoká škola	Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave
Fakulta	FPV UCM
Kód predmetu	KCH/md270/21
Názov predmetu	počítačové modelovanie molekúl
Rozsah	1P + 2S
Počet kreditov	4
Vyučujúci	prof. RNDr. Ján Titiš, PhD. (prednášajúci)

Podmienky na absolvovanie predmetu

Účasť na prednáškach a cvičeniach. V priebehu semestra budú 2 písomné previerky, každá za 25 bodov. Z každej musí študent získať minimálne 50 % bodov. Skúška bude mať písomnú a praktickú časť (riešenie úlohy na počítači), celkovo za 50 bodov. Spolu môže študent získať 100 bodov.

Celkové hodnotenie predmetu:

A 1,0 výborne – vynikajúce výsledky len s minimálnymi chybami < 92-100 % >;

B 1,5 veľmi dobre – nadpriemerné výsledky s menšími chybami < 83-91 % >;

C 2,0 dobre – vcelku dobré, priemerné výsledky < 74-82 % >;

D 2,5 uspokojivo – dobré výsledky, ale vyskytujú sa významné chyby < 65-73 % >;

E 3,0 dostatočne – výsledky vyhovujú minimálnym kritériám < 56-64 % >;

FX* 4,0 nedostatočne – absolvovanie predmetu si vyžaduje vynaložiť ešte značné úsilie a množstvo práce zo strany študenta < 0-55 % >.

Priebežné hodnotenie

Účasť na prednáškach a cvičeniach. V priebehu semestra budú 2 písomné previerky, každá za 25 bodov. Z každej musí študent získať minimálne 50 % bodov. Skúška bude mať písomnú a praktickú časť (riešenie úlohy na počítači), celkovo za 50 bodov. Spolu môže študent získať 100 bodov.

Záverečné hodnotenie

Celkové hodnotenie predmetu:

A 1,0 výborne – vynikajúce výsledky len s minimálnymi chybami < 92-100 % >;

B 1,5 veľmi dobre – nadpriemerné výsledky s menšími chybami < 83-91 % >;

C 2,0 dobre – vcelku dobré, priemerné výsledky < 74-82 % >;

D 2,5 uspokojivo – dobré výsledky, ale vyskytujú sa významné chyby < 65-73 % >;

E 3,0 dostatočne – výsledky vyhovujú minimálnym kritériám < 56-64 % >;

FX* 4,0 nedostatočne – absolvovanie predmetu si vyžaduje vynaložiť ešte značné úsilie a množstvo práce zo strany študenta < 0-55 % >.

Výsledky vzdelávania

Absolvovaním profilového predmetu študent získa:

- vedomosti o metódach a princípoch používaných pri projektovaní, výskume a vývoji nových zlúčenín, materiálov a liečiv v rámci novo konštituovaného racionálneho projektovania molekúl

CAMD (Computer-Aided Molecular Design);

- vedomosti, zručnosti a kompetencie prakticky používať metódy molekulového modelovania na riešenie problémov v chémii a biochémii.

Stručná osnova predmetu

1. Základné princípy molekulového modelovania, základy kvantovej chémie a molekulovej mechaniky.
2. Ab initio metódy, Hartreeho-Fockova metóda, metódy so zahrnutím elektrónovej korelácie.
3. Semiempirické metódy, metódy funkcionálu hustoty (DFT).
4. Metódy silového poľa, hybridné metódy, molekulová dynamika.
5. Metódy kvantitatívnych vzťahov štruktúra-vlastnosť (QSPR).
6. Aplikačný softvér, využitie počítačovej grafiky na zobrazovanie a manipuláciu s chemickými štruktúrami.
7. Optimalizácia molekulovej štruktúry, analýza vlnovej funkcie.
8. Modelovanie spektrálnych vlastností.
9. Modelovanie procesov v roztoku.
10. Modelovanie termodynamiky a kinetiky chemických reakcií.
11. Základy in silico vývoja nových materiálov a liečiv.
12. Určenie konformácie a odhad podobnosti súboru zlúčenín, výpočet interakčnej energie medzi molekulami liečiva a štruktúrami makromolekúl (receptory).
13. Opakovanie.

Odporúčaná literatúra

Milan Remko, Molekulové modelovanie, Slovak Academic Press, 2000, 239 strán.

Remko, M.: Základy medicínskej a farmaceutickej chémie. Bratislava, SAP, 392 s., 2005. ISBN 80-89104-64-9.

Titiš, J., Nemeček, P.: Počítačové modelovanie molekúl. UCM Trnava, 2017.

Jazyk, ktorého znalosť je potrebná na absolvovanie predmetu

slovenský jazyk, anglický jazyk