



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY



Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Alternatywne metody oceny ryzyka substancji chemicznych ZAO		13.3.0523	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	niestacjonarne (zaoczne)
		moduł	zarządzanie substancjami niebezpiecznymi
		specjalnościowy	
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Tomasz Puzyn; dr inż. Karolina Jagiełło; dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		5	
Wykład, Ćw. laboratoryjne		zajęcia 27 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 30 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 68 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 125 godz. - 5 ECTS	
Ćw. laboratoryjne: 18 godz., Wykład: 9 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2020/2021 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
<ul style="list-style-type: none"> - Wykład z prezentacją multimedialną - ćwiczenia laboratoryjne (pracowania komputerowe): wykonywanie ćwiczeń (obejmujących poszczególne grupy zagadnień poruszanych na wykładzie) w pracowni komputerowej na podstawie instrukcji otrzymanej od prowadzącego, połączone z analizą, dyskusją i prezentacją uzyskanych wyników. 		Sposób zaliczenia	
		<ul style="list-style-type: none"> - Zaliczenie na ocenę - Egzamin 	
		Formy zaliczenia	
		<ul style="list-style-type: none"> - egzamin pisemny testowy - wykonanie pracy zaliczeniowej - przeprowadzenie badań i prezentacja ich wyników 	
		Podstawowe kryteria oceny	

Wykład:

- Egzamin pisemny składający się z kilkunastu pytań testowych obejmujących zagadnienia wymienione w treściach programo-wych wykładu oraz ćwiczeń laboratoryjnych.
- Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny z egzaminu pisemnego jest zdobycie minimum 51% punktów możliwych do uzyskania z egzaminu. Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim regulaminem studiów.
- Negatywna ocena z egzaminu (pisemnego i ustnego) musi być po-prawiona podczas dodatkowego egzaminu odbywającego się w oparciu o te same zasady co egzamin w pierwszym terminie.

Ćwiczenia:

- Samodzielne wykonanie wszystkich ćwiczeń w pracowni komputerowej. Nieobecność można odrobić podczas zajęć z inną grupą ćwiczeniową.
- Prezentacja oraz naukowa dyskusja uzyskanych w trakcie zajęć wyników.
- Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny jest otrzymanie min. 51% możliwych do uzyskania punktów za wykonane ćwiczenia oraz zaprezentowanie wyników.
- Ocena może być podwyższona o połowę studentom szczególnie aktywnie uczestniczącym w dyskusji naukowej podczas zajęć.

Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

Student podczas zaliczenia przedmiotu wykazuje się wiedzą jak zbudować i prawidłowo ocenić modelu QSAR, jak prawidłowo odpowiedzieć na pytanie zakresu rodzajów deskryptorów oraz metod ich obliczania (K_W06); wskazuje zastosowania metod QSAR i read-across w projektowaniu leków, chemii kosmetyków, chromatografii, chemii fizycznej, a także w ocenie ryzyka stwarzanego przez nowe związków chemicznych zna oprogramowanie wykorzystywane w modelowaniu QSAR (K_W10).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Podczas zajęć laboratoryjnych student buduje prosty model QSAR/QSPR, weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania, prowadzi dyskusję uzyskanych wyników odnosząc się do wcześniej zdobytej wiedzy z zakresu nauk chemicznych oraz pokrewnych dyscyplin naukowych (K_U04).

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

Student dostrzega korzyści z wykorzystania metod QSAR w kontekście społecznym i ekonomicznym; rozumie potrzebę dalszego kształcenia się (K_K01); wykazuje kreatywność w pracy w grupie (K_K02)

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. Wymagania formalne

brak

B. Wymagania wstępne

Posiadanie wiedzy podstawowej z zakresu chemii oraz nauk przyrodniczych.

Cele kształcenia

- Zaznajomienie studentów z obecnym stanem wiedzy i poziomem zaawansowania komputerowych metod przewidywania toksyczności rekomendowanych w rozporządzeniu REACH jako metody alternatywne.
- Zapoznanie studentów z metodologią QSAR i jej współczesnymi wyzwaniami.
- Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem, które może być użyte w modelowaniu toksyczności substancji chemicznych.

Treści programowe

A. Problematyka wykładu

- Najważniejsze komputerowe metody przewidywania toksyczności.
- Źródła danych eksperymentalnych do modelowania QSAR.
- Metody wstępnej kontroli danych: problem brakujących danych oraz tzw. punktów odbiegających, transformacje zmiennych, normalizacja rozkładu, badanie korelacji i kowariancji pomiędzy zmiennymi.
- Idea i metody obliczania deskryptorów strukturalnych.
- Wykorzystanie metod analizy podobieństwa oraz metod read-across do grupowania toksycznych związków chemicznych.
- Etapy budowania i walidacji modeli QSAR. Wiarygodność modeli QSAR. Kryteria jakości dla modeli QSAR występujące w REACH oraz w regulacjach prawnych innych państw (Japonia, USA).
- Kryteria jakości modelu QSAR sugerowane przez OECD, które muszą być spełnione, aby wyniki zostały uznane za wiarygodne.
- Wytyczne Wspólnotowego Centrum Badawczego w zakresie QSAR.

B. Problematyka ćwiczeń komputerowych

- Rola jakości danych eksperymentalnych i chemometryczne metody wstępnej oceny jakości danych.
- Przygotowanie modeli cząsteczek w zapisie współrzędnych wewnętrznych.

- Optymalizacja geometrii molekuly przy wykorzystaniu metod kwantowo-mechanicznych, oraz obliczenia deskryptorów struktury.
- Metody analizy podobieństwa (hierarchiczna analiza skupień – HCA, analiza głównych składowych – PCA)
- Podstawowe techniki w modelowaniu QSAR.
- Metody klasyfikacji i grupowania toksycznych związków chemicznych.
- Przegląd gotowych modeli komercyjnie dostępnych na rynku

Wykaz literatury

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

A.1. wykorzystywana podczas zajęć

- Instrukcje do ćwiczeń przygotowywane przez prowadzących zajęcia
- Rozporządzenie (WE) nr 1907/2006 Parlamentu Europejskiego i Rady z dnia 18 grudnia 2006 r. w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH) i utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów, zmieniające dyrektywy 1999/45/WE oraz uchylające rozporządzenie Rady (EWG) nr 793/93 i rozporządzenie Komisji (WE) nr 1488/94, jak również dyrektywy Rady 76/769/EWG i dyrektywy Komisji 91/155/EWG, 93/67/EWG, 93/105/WE i 2000/21/WE.
- OECD 2004: Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistence and Long-Range Transport, OECD Environment, Health and Safety Publications, Paris, France.

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta

- G.W vanLoon, S.J. Duffy: Chemia środowiska. Wydawnictwo Naukowe PWN (2008). ISBN: 978-83-01-15324-3.
- T. Puzyn, A. Mostrag-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.

B. Literatura uzupełniająca

- S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (red): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009
- R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 2005
- D. Zuba, A Parczewski (red.): Chemometria w analityce: wybrane zagadnienia. Kraków: Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, 2008
- JM. Dobosz: Wspomagana komputerowo statystyczna analiza danych. Warszawa: Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa 2004

Kierunkowe efekty kształcenia

K_W06 stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności

K_W10 operuje wiedzą dotyczącą zasad działania podstawowej aparatury naukowobadawczej stosowanej w chemii

K_U04 stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych

K_K01 zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby

K_K02 pracuje w zespole przyjmując w nim różne role

Wiedza

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. wie na czym polega proces konstruowania oraz walidacji modelu QSAR zgodnie z zaleceniami OECD;
2. zna podstawowe rodzaje deskryptorów struktury chemicznej oraz metody ich obliczania;
3. wskaże zastosowania metod QSAR i read across w projektowaniu leków, chemii kosmetyków, chromatografii, chemii fizycznej, a także w ocenie ryzyka stwarzanego przez nowe związków chemicznych;
4. wymieni główne wyzwania stojące przed metodami QSAR;
5. zna oprogramowanie wykorzystywane w modelowaniu QSAR;
6. rozumie zasady funkcjonowania systemu REACH w Europie oraz wynikające z niego obowiązki prawne;
7. wskaże związki/grupy związków chemicznych stanowiących duże zagrożenie dla zdrowia człowieka i środowiska przyrodniczego.

Umiejętności

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. potrafi samodzielnie zbudować prosty model QSAR/QSPR, poprawnie przeprowadzić jego walidację oraz wykonać predykcję zmiennej zależnej na podstawie wartości deskryptorów struktury;
2. krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania i jest w stanie odnieść je do panujących obecnie przepisów.

Kompetencje społeczne (postawy)

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. dostrzega korzyści z wykorzystania metod QSAR w kontekście społecznym (poprawa jakości życia społeczeństwa) i ekonomicznym (ograniczenie kosztów badań);
2. rozumie potrzebę dalszego kształcenia się;
3. wykazuje kreatywność w pracy grupie;
4. wykazuje odpowiedzialność za wykonywaną pracę.

Kontakt

tomasz.puzyn@ug.edu.pl