

Nazwa przedmiotu			Kod ECTS
Wstęp do modelowania molekularnego			13.3.0609
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Organicznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
dr Rafał Ślusarz			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin			Liczba punktów ECTS
Formy zajęć			3 zajęcia 45 godz. konsultacje 15 godz. praca własna studenta 15 godz. RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS
Wykład, Ćw. laboratoryjne			
Sposób realizacji zajęć			
zajęcia on-line, zajęcia w sali dydaktycznej			
Liczba godzin			
Wykład: 15 godz., Ćw. laboratoryjne: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2017/2018 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
- Wykonywanie doświadczeń - blended learning (zajęcia w prowadzone on-line i stacjonarnie) Metody: •prezentacja multimedialna •opracowanie problemowe z zagadnieniami do samodzielnego poznania •dyskusja na forum przedmiotu - •ćwiczenia w pracowni informatycznej (stacjonarne) •praca własna przy komputerze (on-line)		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru	
		Podstawowe kryteria oceny	
		Oceny cząstkowe z wykładu wystawiane są na podstawie quizów organizowanych w Portalu Edukacyjnym UG: testów jedno- i wielokrotnego wyboru, pytań zamkniętych, pytań z krótką odpowiedzią ustną, pytań typu „prawda czy fałsz” i „dopasowywanie odpowiedzi”.	
		Z ćwiczeń oceny cząstkowe wystawiane są na podstawie rozwiązywanych praktycznych zadań problemowych, projektów lub prezentacji oraz odpowiedzi otwartych na postawione problemy.	
		Ocena zaliczeniowa jest średnią arytmetyczną ocen cząstkowych.	
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			
Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:			
Student poprawnie rozwiązuje testy związane z metodami obliczeniowymi (K_W09); w testach właściwie wybiera programy i algorytmy obliczeniowe do rozwiązania postawionego problemu (K_W09).			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:			
Podczas wykonywania zadań zaliczeniowych student prowadzi obliczenia w adekwatnych do postawionego problemu programach obliczeniowych (K_U05); poprawnie rozwiązuje postawione problemy wykorzystując umiejętności zdobyte poza wykładem i przepisami do ćwiczeń (K_U09).			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
W testach wielokrotnego wyboru student wybiera odpowiedzi znacznie rozszerzające minimalne, wymagane poprawne rozwiązania postawionych problemów (K_K07).			
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi			

A. Wymagania formalne Technologia Informatyczna, Informatyka lub kurs zbliżony tematycznie	
B. Wymagania wstępne wymagana jest znajomość języka angielskiego w stopniu co najmniej podstawowym oraz ogólne zrozumienie budowy związków chemicznych.	
Cele kształcenia Wprowadzenie studenta do tematyki modelowania molekularnego.	
Treści programowe A. Problematyka wykładu: Zarys zasad tworzenia i reprezentacji struktur chemicznych; konwencje i stosowane na przestrzeni historii metody wizualizacji i symulacji związków chemicznych. B. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych: Przygotowywanie reprezentacji dwu- i trójwymiarowych struktur związków chemicznych; proste symulacje komputerowe dynamiki i optymalizacji geometrii układów.	
Wykaz literatury A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu): brak (stosowane są źródła on-line) B. Literatura uzupełniająca -	
Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe) K_W08: wykazuje się znajomością podstawowych metod obliczeniowych do rozwiązywania problemów z zakresu chemii, fizyki i matematyki K_W09: opisuje praktyczne zastosowania narzędzi informatycznych (programów komputerowych) do obliczeń chemicznych i analizy danych K_U05: stosuje podstawowe metody statystyczne i techniki informatyczne do opisu procesów chemicznych i analizy danych eksperymentalnych K_U09: umie uczyć się samodzielnie K_K07: docenia potrzebę przystępnego przedstawiania społeczeństwu wybranych zagadnień chemicznych	Wiedza Student nazywa metody projekcji oraz definiuje zakres przekazywanych informacji w każdej z reprezentacji molekularnych, wyjaśnia różnice pomiędzy widzeniem prostym i krzyżowym, ilustruje korzyści płynące z zastosowania wybranych metod prezentacji
	Umiejętności Student rozpoznaje typy reprezentacji graficznych dowolnych związków chemicznych, klasyfikuje typy reprezentacji; ocenia ich przydatność w prezentacji wyników, proponuje najlepsze metody wizualizacji związków chemicznych, wykazuje kreatywność w przygotowywaniu prezentacji chemicznych.
	Kompetencje społeczne (postawy) Student rozumie potrzebę dalszego kształcenia się, krytycznie podchodzi do spotykanych zestawień i dyskusji wyników, samodzielnie planuje najbardziej korzystne możliwości przedstawiania zagadnień strukturalnych.
Kontakt rafal.slusarz@ug.edu.pl	