


**KAPITAŁ LUDZKI**  
 NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez  
 Unię Europejską w ramach  
 Europejskiego Funduszu  
 Społecznego

**UNIA EUROPEJSKA**  
 EUROPEJSKI  
 FUNDUSZ SPOŁECZNY


<b>Nazwa przedmiotu</b>		<b>Kod ECTS</b>	
Wykład monograficzny - Oprogramowanie w chemii obliczeniowej		13.3.0443	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
Katedra Chemii Teoretycznej			
<b>Studia</b>			
<b>wydział</b>	<b>kierunek</b>	<b>poziom</b>	<b>drugiego stopnia</b>
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia biomedyczna, chemia i technologia środowiska, analityka i
		specjalnościowy	diagnostyka chemiczna, chemia obliczeniowa
		specjalizacja	wszystkie
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
prof. dr hab. Cezary Czapplewski, profesor uczelni; prof. dr hab. Józef Liwo			
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>	
<b>Formy zajęć</b>		3	
Wykład		zajęcia 30 godz.	
<b>Sposób realizacji zajęć</b>		konsultacje 10 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 35 godz.	
<b>Liczba godzin</b>		RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS	
Wykład: 30 godz.			
<b>Termin realizacji przedmiotu</b>			
2022/2023 letni			
<b>Status przedmiotu</b>		<b>Język wykładowy</b>	
obowiązkowy		polski	
<b>Metody dydaktyczne</b>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>	
Wykład z prezentacją multimedialną		<b>Sposób zaliczenia</b>	
		Zaliczenie na ocenę	
		<b>Formy zaliczenia</b>	
		wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	
		poprawność merytoryczna i atrakcyjność prezentacji wybranego programu z zakresu chemii obliczeniowej	
		kryteria oceny zgodne z Regulaminem Studiów UG	
<b>Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się</b>			
Sposób weryfikacji przyswojonej wiedzy:			
Ocena przedstawionej przez studenta prezentacji o wybranej metodzie chemii obliczeniowej wykraczającej poza kanoniczny kurs chemii (K_W01; K_W05) a jednocześnie odnoszącej się do aktualnie dostępnego oprogramowania realizującego tą metodę w praktyce i najnowszych jej zastosowań. (K_W11)			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
W toku przygotowania i przedstawienia przez studenta prezentacji weryfikowane są zdolności studenta do krytycznego myślenia oraz umiejętności wyszukiwania koniecznych materiałów. (K_K01)			
<b>Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi</b>			
<b>A. Wymagania formalne</b>			
Technologia informacyjna, Chemia kwantowa, Chemia teoretyczna			
<b>B. Wymagania wstępne</b>			
umiejętność pracy w systemie Unix, podstawy chemii kwantowej, posługiwanie się terminologią i nomenklaturą dotyczącą chemii kwantowej,			

umiejętność opisu geometrii cząsteczek związków chemicznych, podstawy mechaniki statystycznej i mechaniki molekularnej	
<b>Cele kształcenia</b>	
Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem do obliczeń z zakresu chemii kwantowej oraz mechaniki i dynamiki molekularnej.	
<b>Treści programowe</b>	
Posługiwanie się językami powłok systemu UNIX. Edytor strumieniowy sed i program awk oraz ich zastosowanie do obróbki wyników otrzymanych z programów obliczeniowych. Uruchamianie zadań w centrach obliczeniowych. Systemy kolejowania: PBS, LSF i NQS. Oprogramowanie metod ab initio i półempirycznych chemii kwantowej: pakiety GAMESS, GAUSSIAN, MOPAC, MOLPRO, TURBOMOLE. Oprogramowanie mechaniki i dynamiki molekularnej: pakiety AMBER, GROMACS, TINKER, NAMD, ECEPPAK. Przeglądarki i edytory molekularne: Avogadro, Molden, MolMol, RasMol, Pymol, VMD, Chimera, Sirius. Baza CSDS struktur krystalograficznych małych molekuł i baza PDB struktur biomolekuł oraz korzystanie z nich.	
<b>Wykaz literatury</b>	
D.W. Heermann, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, 1997 L. Piel, Idee chemii kwantowej, PWN, 2018 A. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, Prentice Hall, 2001 C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, Wiley, 2004	
<b>Kierunkowe efekty uczenia się</b>	<b>Wiedza</b>
K_W01: operuje pogłębioną wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych; K_W05: operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności; K_W11: wykazuje się pogłębioną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie; K_K01: zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;	Student rozpoznaje i charakteryzuje dostępne oprogramowanie do obliczeń z zakresu chemii kwantowej oraz mechaniki i dynamiki molekularnej. Rozróżnia programy do obliczeń z zakresu chemii kwantowej od programów stosujących metody mechaniki molekularnej.
	<b>Umiejętności</b>
	<b>Kompetencje społeczne (postawy)</b>
	Poznaje zasady bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy na superkomputerach w centrach obliczeniowych.
<b>Kontakt</b>	
cezary.czaplewski@ug.edu.pl	